

НАЦІОНАЛЬНИЙ ТЕХНІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ УКРАЇНИ
«КИЇВСЬКИЙ ПОЛІТЕХНІЧНИЙ ІНСТИТУТ
імені ІГОРЯ СІКОРСЬКОГО»
ФІЗИКО-ТЕХНІЧНИЙ ІНСТИТУТ
Кафедра інформаційної безпеки

«На правах рукопису»

УДК 51.76

«До захисту допущено»

В.о. завідувача кафедри

_____ М.В.Грайворонський

“ ” _____ 2018 р.

Магістерська дисертація
на здобуття ступеня магістра

зі спеціальності: 113 Прикладна математика

на тему: Математичні моделі полімерів у періодичному середовищі

Виконав (-ла): студент (-ка) 2 курсу, групи ФІ-71мп
(шифр групи)

Величко Вікторія Валеріївна
(прізвище, ім'я, по батькові)

_____ (підпис)

Науковий керівник к.ф.-м.н., доц. Орехов Олександр Арсенійович
(посада, науковий ступінь, вчене звання, прізвище та ініціали)

_____ (підпис)

Консультант

_____ (назва розділу)

_____ (науковий ступінь, вчене звання, прізвище, ініціали)

_____ (підпис)

Рецензент

_____ (посада, науковий ступінь, вчене звання, науковий ступінь, прізвище та ініціали)

_____ (підпис)

Засвідчую, що у цій магістерській
дисертації немає запозичень з праць інших
авторів без відповідних посилань.
Студент _____
(підпис)

Київ – 2018 року

НАЦІОНАЛЬНИЙ ТЕХНІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ УКРАЇНИ
«КИЇВСЬКИЙ ПОЛІТЕХНІЧНИЙ ІНСТИТУТ
імені ІГОРЯ СІКОРСЬКОГО»
ФІЗИКО-ТЕХНІЧНИЙ ІНСТИТУТ
Кафедра інформаційної безпеки

Рівень вищої освіти – другий (магістерський) за освітньо-професійною програмою
Спеціальність (спеціалізація) – 113 Прикладна математика («Математичні методи комп'ютерного моделювання»)

ЗАТВЕРДЖУЮ

В.о. завідувача кафедри

_____ М.В.Грайворонський
(підпис)

« ____ » _____ 2018 р.

ЗАВДАННЯ
на магістерську дисертацію студенту

Величко Вікторії Валеріївні
(прізвище, ім'я, по батькові)

1. Тема дисертації Математичні моделі полімерів у періодичному середовищі

науковий керівник дисертації к.ф.-м.н., доц. Орехов Олександр Арсенійович,
(прізвище, ім'я, по батькові, науковий ступінь, вчене звання)

затверджені наказом по університету від «15» листопада 2018 р. № 4171-с

2. Термін подання студентом дисертації 10.12.2018 р.

3. Об'єкт дослідження _____

4. Вихідні дані _____

5. Перелік завдань, які потрібно розробити _____

6. Орієнтовний перелік ілюстративного матеріалу _____

7. Орієнтовний перелік публікацій _____

8. Консультанти розділів дисертації*

Розділ	Прізвище, ініціали та посада консультанта	Підпис, дата	
		завдання видав	завдання прийняв

9. Дата видачі завдання _____

Календарний план

№ з/п	Назва етапів виконання магістерської дисертації	Термін виконання етапів магістерської дисертації	Примітка

Студент

_____ (підпис)

_____ (ініціали, прізвище)

Науковий керівник дисертації

_____ (підпис)

_____ (ініціали, прізвище)

* Консультантом не може бути зазначено наукового керівника магістерської дисертації.

РЕФЕРАТ

Обсяг роботи 58 сторінок, 7 ілюстрацій, 9 джерел літератури.

Об'єктом дослідження є полімери.

Предметом дослідження є математичні моделі полімерів у періодичному середовищі.

В данній роботі було розглянуто класифікацію полімерних молекул за геометрією скелета; наведені основні моделі, які використовуються при дослідженні полімерів. Основна увага була приділена гауссовій моделі лінійного полімерного ланцюга, зокрема її було виведено з дискретної моделі полімера - випадкового блукання. Також розглянуті основні геометричні характеристики гауссової моделі (локальний час та локальний час самоперетину) та наведені їх властивості. Було доведено існування локального часу для випадкового поля, побудованого за допомогою вінеровського процесу. Отримане твердження можливо використовувати в подальших дослідженнях, зокрема в побудові математичної моделі реального лінійного ланцюга, тобто такого що не має самоперетинів. Крім того наведене усереднення характеристик полімерів у періодичному середовищі.

ПОЛІМЕР, ЛОКАЛЬНИЙ ЧАС, ЛОКАЛЬНИЙ ЧАС САМОПЕРЕТИНУ, ВІНЕРОВСЬКИЙ ПРОЦЕС

ABSTRACT

The volume of work of 58 pages, 7 illustrations, 9 sources of literature.

The object of research is polymers.

The subject of research is mathematical models of polymers in a periodic environment.

In this paper is given the classification of polymeric molecules according to the geometry of the skeleton, and presents the basic models used in the study of polymers. The main attention was paid to the Gaussian model of the linear polymer chain, in particular, it was derived from a discrete polymer model - random walk. Also reviewed the basic geometric characteristics of the Gaussian model (local time and local time of self-intersection) and their properties. It was proved that there exists a local time for a random field constructed using Wiener process. The resulting statement can be used in further researches, in particular, in the construction of a mathematical model of a real linear chain, that does not have self-intersections. Besides, the averaging of the characteristics of polymers in the periodic environment is given.

POLYMER, LOCAL TIME, LOCAL TIME OF SELF-INTERSECTION, WIENER PROCESS

ЗМІСТ

Перелік умовних позначень, символів, одиниць, скорочень і термінів. . . .	7
Вступ	8
1 Методи моделювання полімерів.	11
1.1 Одновимірна модель.	13
1.2 Двовимірна модель	15
1.3 Тривимірна модель	17
1.4 Неперервна модель	17
1.5 Фізичні моделі.	21
Висновок до розділу 1	24
2 Геометричні характеристики полімерів	25
2.1 Локальний час самоперетину	25
2.2 Локальний час	40
Висновок до розділу 2	46
3 Усереднення характеристик полімерів у періодичному середовищі. . . .	47
Висновок до розділу 3	55
Висновок	57
Перелік джерел посилань	58

**ПЕРЕЛІК УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ, ОДИНИЦЬ, СКОРОЧЕНЬ І
ТЕРМІНІВ**

ВСТУП

Актуальність роботи.

Полімер - це унікальна речовина, що набула великого поширення у світі. Вважається, що полімери, будучи неживими речовинами, лягли в основу життя, адже вони можуть обмінюватися інформацією між собою та самовідтворюватися. Полімери мають різноманитну фізичну будову, вирізняються своєю гнучкістю і просторовою структурою, що змінюється. Маючи такі властивості вони зустрічаються у мінералах і пластиках, в полісахаридах і білках. Важливим прикладом є складна людська ДНК і РНК, що відповідають за передачу інформації у спадок.

В данній роботі особливу увагу було приділено дослідженню полімерів, що мають лінійну геометричну структуру. Прикладами таких речовин є натуральний каучук, целюлоза, капрон, поліетилен низького тиску та інші. Особливістю полімерів такого виду, є наявність ефекту виключеного об'єму, тобто два мономер не можуть займати одне місце в просторі, це важливо враховувати при побудові математичних моделей.

Зазвичай при дослідженнях, в якості моделі полімерів використовують гауссовий ланцюг. Тобто конформацією полімера є реалізація вінеровського процесу у заданому просторі. В цьому випадку необхідно враховувати наявність самоперетинів, для дослідження різниці між ідеальним та реальним ланцюгом. Тому облік кількості самоперетинів у траєкторії випадкового процесу має реальне прикладне значення. Для дослідження цієї характеристики було запропоновано ввести поняття локального часу самоперетину, що виникає при дослідженні геометричних властивостей траєкторій випадкових процесів. Важливе прикладне значення, що пов'язане з дослідженнями полімерів має знаходження усереднених характеристик матеріалу, таких як теплопровідність, електропровідність та інші. Це можливо застосовувати в багатьох галузях, наприклад, в досліджен-

ні композиційних та перфорованих матеріалів, теорії фільтрації та в багатьох інших фізичних та механічних аспектах.

Мета і завдання дослідження.

Метою данної роботи є знаходження усереднення характеристик полімерів у періодичному середовищі та у розширенні теорії пов'язаної з локальним часом самоперетину випадкових процесів. Для досягнення данної мети були поставлені наступні завдання:

- 1) Вивчити наукову літературу, що стосується теми дослідження.
- 2) Розглянути деякі математичні моделі полімерів.
- 3) Детально вивчити гауссову модель полімерів та пов'язані з ним геометричні характеристики.
- 4) Довести існування локального часу випадкового поля, побудованого за допомогою вінеровського процесу.
- 5) Знайти усереднення характеристик полімерів у періодичному середовищі.

Об'єкт дослідження: полімери

Предмет дослідження: математичні моделі полімерів у періодичному середовищі

Методи дослідження.

Основними методами дослідження були вивчення та аналіз спеціальної літератури з теми дослідження, а також аналіз математичних моделей полімерів.

Наукова новизна одержаних результатів.

Наукова новизна одержаних результатів полягає у розширенні теорії пов'язаної з локальним часом самоперетину випадкових процесів. А саме, було доведено існування локального часу для випадкового поля виду:

$$Y(t) = (w(t_2) - w(t_1), w(t_3) - w(t_2), \dots, w(t_{n+1}) - w(t_n)),$$

де $\{w(t), t \in \mathbb{R}_+\}$ - вінеровський процес в $\mathbb{R}^d, d = 2, 3$. За основу цього твердження було взято теорему доведену Дж. Розеном, в якій ідеться про існування локального часу випадкового процесу $X(t) = w(t_2) - w(t_1)$.

Також було знайдено усереднення характеристик полімера у періодичному середовищі. Для цього було досліджено збіжність інтеграла виду: $\int_B p_\varepsilon(X(t)) dt$, де $p : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ - періодична функція, з періодом 1 по кожній координаті, $p_\varepsilon(u) = p(\frac{u}{\varepsilon})$, а $B \in \mathbb{R}^2$ - обмежена борелівська множина.

Практичне значення одержаних результатів.

Практична значимість дослідження полягає в можливості використання результатів при вивченні хімічних та фізичних властивостей полімерів, композиційних та перфорованих матеріалів, теорії фільтрації та в багатьох інших галузях.

1 МЕТОДИ МОДЕЛЮВАННЯ ПОЛІМЕРІВ

Полімер - це високомолекулярна сполука, що складається з однакових елементів (мономерів), що повторюються; або з різних, але схожих між собою. Якщо полімер складається з n мономерів, значить він має ступінь полімеризації - n . Зазвичай це значення лежить в діапазоні $10^4 - 10^5$. Миттєва форма, яку приймає полімерний ланцюг в розчині, називається конформацією.

На рисунку 1.1 представлено три види полімерних молекул:

- 1) Лінійний - це полімер, молекули якого схожі на довгі ланцюги, що не мають розгалужень або ж які мають короткі відгалуження в межах однієї мономерної ланки;
- 2) Розгалужений - це полімер, який має бічні відгалуження від основного ланцюга. Число відгалужень і їх розмір можуть змінюватися в дуже широких межах;
- 3) Полімерна сітка - полімер зі складною топологічною структурою, що утворює єдину просторову сітку.

В наведених схемах кулька є мономером.



Рисунок 1.1 — Архітектура полімерного ланцюга.

Зазвичай полімерний ланцюг моделюють як випадкове блукання. Тобто траєкторія, яка утворюється при здійсненні послідовних випадкових кроків, є

конформацією полімерного ланцюга. Така модель широко використовується, оскільки для інтерпретації великомасштабних характеристик полімерів, які можливо виміряти експериментально, достатньо використовувати спрощені моделі. Такі спрощені моделі дозволяють уникнути великих складнощів, що виникають при спробі точно описати конформацію макромолекул з урахуванням їх конкретної хімічної структури і внутримолекулярної взаємодії всіх утворюючих її атомів, так само як і їх взаємодії з навколишнім середовищем.

Якщо відвідування одного і того ж місця дозволено, траєкторія випадкового блукання є моделлю ідеального ланцюга. Якщо ж це не дозволено, траєкторія нагадує справжній ланцюг. «Ідеальність» таких моделей означає, що вони не враховують ніяких внутрішньо молекулярних взаємодій мономерних ланок крім їх зв'язності в ланцюг. Зокрема, при цьому не враховується наявність у мономерних ланок власного (виключеного для інших ланок) об'єму. Як показано на рисунку 1.2 конформація ланцюгів майже однакова, за винятком невеликої області, де дві частини ланцюга наближаються, як показано пунктирними лініями. [1]



Рисунок 1.2 — Конформації ідеального ланцюга (а) та реального ланцюга (б).

Ідеального ланцюга насправді не існує, але ця модель широко використовується, оскільки вона дозволяє математично строго вирішувати різні проблеми, які виникають в задачах пов'язаних з полімерами. Дуже важливо, що в деяких розчинах ідеальний полімер поводить себе як справжній. Наприклад, у концентрованих розчинах.

Побудуємо тривимірну модель ідеального полімерного ланцюга, за допомогою випадкового блукання. Для цього спочатку розглянемо одновимірний ви-

падок.

1.1 Одновимірна модель

Нехай випадкове блукання рухається з кроком b праворуч, або ліворуч, в кожену сторону з вірогідністю 0.5 (рисунок 1.3). Таким чином траєкторія випадкового блукання отриманих з N кроків моделює ланцюг довжиною Nb . Кожний наступний крок не залежить від попередніх рухів. Так як моделюємо ідеальний ланцюг будемо вважати, що випадкове блукання може повертатися до місць, які раніше відвідував.



Рисунок 1.3 — Можливі кроки в одновимірній моделі випадкового блукання.

Так як випадкове блукання з вірогідністю $p = 0.5$ рівносильно підкиданню монетки, значить випадкова величина ξ - кількість кроків вліво розподілена за біноміальним законом:

$$P_n = P(\xi = n) = C_N^n \left(\frac{1}{2}\right)^n \left(\frac{1}{2}\right)^{N-n}, \quad (1.1)$$

де N - загальна кількість кроків.

В данному випадку $M\xi = \frac{N}{2}$, тобто в середньому випадкове блукання половину кроків робить вліво. Відповідно $D\xi = \frac{N}{4}$.

Переведемо ці статистичні характеристики випадкової величини ξ в терміни x_N - фінальної позиції випадкового блукання на прямій. Тобто $x_N = \xi b + (N - \xi)(-b) = b(2\xi - N)$, тоді $Mx_N = 0, Dx_N = Nb^2$.

Нехай $\triangle x_n$ - зміщення, яке відбувається на n -ом кроці. Тобто $\triangle x_n$ дорівнює

b або $-b$ з рівною ймовірністю. Відповідно $M\Delta x_n = 0, D\Delta x_n = b^2$. При цьому $\{\Delta x_n\}_{n=1, N}$ - множина незалежних випадкових величин, відповідно $cov(\Delta x_n, \Delta x_m) = b^2 \delta_{nm}$. При цьому повне зміщення, тобто фінальна позиція випадкового блукання $x_N = \sum_{i=1}^N \Delta x_i$.

Розглянемо як значення P_n веде себе, коли N прагне до нескінченності. Для цього скористаємося формулою Стірлінга:

$$\ln N! \cong N(\ln N - 1)$$

Тоді вираз 1.1 перепишеться наступним чином:

$$\begin{aligned} \ln P_n &= \ln \frac{N!}{n!(N-n)!} \left(\frac{1}{2}\right)^N = -N \ln 2 + \ln N! - \ln n! - \ln(N-n)! = \\ &= -N \ln 2 + N(\ln N - 1) - n(\ln n - 1) - (N-n)(\ln(N-n) - 1) = \\ &= -N \ln 2 + N \ln N - n \ln n - (N-n) \ln(N-n). \end{aligned} \quad (1.2)$$

Зробимо заміну $n = \frac{N}{2} + \frac{x}{2b}$, де x - фінальна позиція яку досягне випадкове блукання, якщо зробити n кроків влівоб зауважимо що це не є випадковою величиною. Перепишемо рівність 1.2 як функцію залежну від x .

$$\begin{aligned} \ln P_n &\cong -N \ln 2 + N \ln N - \left(\frac{N}{2} + \frac{x}{2b}\right) \ln\left(\frac{N}{2} + \frac{x}{2b}\right) - \left(\frac{N}{2} - \frac{x}{2b}\right) \ln\left(\frac{N}{2} - \frac{x}{2b}\right) = \\ &= N \ln N - \left(\frac{N}{2} + \frac{x}{2b}\right) \ln\left(N + \frac{x}{b}\right) - \left(\frac{N}{2} - \frac{x}{2b}\right) \ln\left(N - \frac{x}{b}\right) = \\ &= -\frac{1}{2}N \left[\left(1 - \frac{x}{Nb}\right) \ln\left(1 - \frac{x}{Nb}\right) + \left(1 + \frac{x}{Nb}\right) \ln\left(1 + \frac{x}{Nb}\right) \right] = \\ &= -\frac{1}{2}N \left[\left(1 - \frac{x}{Nb}\right) \left(-\frac{x}{Nb} - \frac{1}{2}\left(\frac{x}{Nb}\right)^2\right) + \left(1 + \frac{x}{Nb}\right) \left(\frac{x}{Nb} - \frac{1}{2}\left(\frac{x}{Nb}\right)^2\right) \right] = -\frac{x^2}{2Nb^2}, \end{aligned}$$

де в останніх рівностях було використано розкладення в ряд Тейлора функцій

$\ln(1+x)$ до другого члена, а саме:

$$\ln(1+x) = x - \frac{x^2}{2} + o(x^3).$$

Отримана рівність не задовільняє умові нормування, тому що використовувалась груба формула Стірлінга. Нормування призводить до наступної рівності:

$$p(x) = (2\pi Nb^2)^{-1/2} e^{-\frac{x^2}{Nb^2}}, \quad (1.3)$$

що є щільністю ймовірності нормального розподілу, з нульовим середнім та дисперсією Nb^2 , а це співпадає з середнім та дисперсією дискретної моделі.

Таким чином для доволі великих значень N біноміальний розподіл наближається до нормального.

1.2 Двовимірна модель

Розглянемо випадкове блукання на решітці з чотирма можливими напрямленнями з шагом b , як показано на рисунку 1.4.

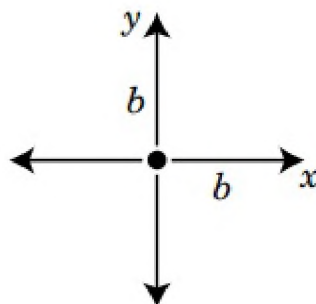


Рисунок 1.4 — Можливі кроки в двовимірній моделі випадкового блукання.

Кожене з напрямлень вибирається з рівною ймовірністю, тобто $p = \frac{1}{4}$. Ко-

жен крок не залежить від попередніх, у двовимірному випадку, як й в одновимірному, випадкове блукання може повертатися до місць, які раніше відвідував (ідеальний ланцюг).

Рух на n -ом кроці може бути описаний випадковим зміщенням $\Delta r_n = (\Delta x_n, \Delta y_n)$.

Весь шлях двовимірного випадкового блукання можна розглядати як рух двох незалежних одновимірних випадкових блукань, кожне з яких розпочинається на початку координат, при цьому одне відбувається у вертикальному напрямлені, а інше - у горизонтальному. Так як $M\Delta x_n = M\Delta y_n = 0$, а $D\Delta x_n = D\Delta y_n = \frac{b^2}{2}$, отже $M\|\Delta r_n\| = 0$ та $D\|\Delta r_n\| = b^2$. Тоді при $N \gg 1$ щільність випадкового блукання по компоненті x наближається до нормального розподілу з 0 середнім та дисперсією $\frac{Nb^2}{2}$:

$$p_{x_N}(x) = (\pi Nb^2)^{-1/2} e^{-\frac{x^2}{Nb^2}},$$

$$\text{де } x_N = \sum_{i=1}^N \Delta x_i.$$

Аналогічне наближення вірно й для компоненти y . Так як рухи по кожному з напрямлень незалежні, тоді:

$$p_{r_N}(\bar{r}) = p_{x_N}(x) \cdot p_{y_N}(y) = (\pi Nb^2)^{-1} e^{-\frac{\|\bar{r}\|^2}{Nb^2}},$$

що відповідає щільності двовимірного нормального розподілу з нульовим математичним очікуванням та коваріаційною матрицею:

$$K = \begin{pmatrix} \frac{Nb^2}{2} & 0 \\ 0 & \frac{Nb^2}{2} \end{pmatrix}$$

1.3 Тривимірна модель

Аналогічно моделям, які були описані вище, в тривимірному випадку розглядається шість рівноймовірних напрямлень. Позначемо $\Delta r_n = (\Delta x_n, \Delta y_n, \Delta z_n)$ - випадкове зміщення. Тоді згідно зі статистичними характеристиками $\Delta x_n, \Delta y_n, \Delta z_n$, а саме: $M\Delta x_n = M\Delta y_n = M\Delta z_n = 0$, а $D\Delta x_n = D\Delta y_n = D\Delta z_n = \frac{b^2}{3}$, отже $M\|\Delta r_n\| = 0$ та $D\|\Delta r_n\| = b^2$. Отримаємо наступне приближення щільності випадкового блукання при $N \gg 1$:

$$p_{r_N}(\bar{r}) = \left(\frac{2\pi Nb^2}{3}\right)^{-3/2} e^{-\frac{3\|\bar{r}\|^2}{2Nb^2}},$$

1.4 Неперервна модель

Випадкове блукання не обмежується рішоткою, тобто крок може бути зроблений у будь-якому напрямленні, але фіксованої довжини b . Приклад траєкторії показано на рисунку 1.5 для двувимірного випадкового блукання у неперервному просторі. Початкова точка - r_0 , зміщення - $\Delta r_1, \Delta r_2, \dots, \Delta r_N$, кінцева позиція - r_N , загальна кількість кроків - N .

Як і в моделі випадкового блукання на рішотці, зміщення не залежать друг від друга.

Так як в данному випадку статистичні характеристики випадкового блукання співпадають з характеристиками випадкового блукання на рішотці: $M\|\Delta r_n\| = 0, D\|\Delta r_n\| = Nb^2$, значить при $N \gg 1$ ймовірнісна щільність розподілу величини r_N у тривимірному випадку наближається наступним:

$$p_{r_N}(\bar{r}) = \left(\frac{2\pi Nb^2}{3}\right)^{-3/2} e^{-\frac{3\|\bar{r}-\bar{r}_0\|^2}{2Nb^2}}.$$

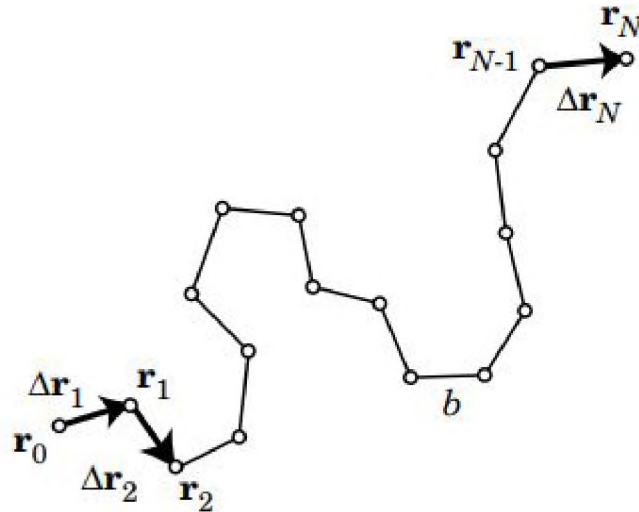


Рисунок 1.5 — Приклад траєкторії двувимірного випадкового блукання з фіксованою довжиною зміщення b .

Довжина кроку також не повинна бути фіксованою. Припустимо, що довжина кроку має якийсь розподіл, але статистичні характеристики Δr_i залишились незмінними. Тоді знову розподіл r_N наближається нормальним. Назвемо таку модель гауссовим ланцюгом.

Отже, якщо розглядати частковий ланцюг з початком у точці r_1 , тоді кінець ланцюга r_n впорядковується гауссовому розподілу. Тобто при фіксованому значенні r_1 щільність розподілу r_2 є

$$p_{r_n}(r_2) = \left(\frac{2\pi nb^2}{3}\right)^{-3/2} e^{-\frac{3\|r_1 - r_2\|^2}{2nb^2}},$$

де частковий ланцюг між двома точками містить n сегментів ($n < N$), з середньою довжиною сегмента b . При цьому n не обов'язково ціле число, значення може змінюватись неперервно.

Цей закон говорить, що гауссовий ланцюг складений з n_1 сегментів та інший гауссовий ланцюг складений з n_2 сегментів можна об'єднати в єдиний гауссовий ланцюг, що складається з $n_1 + n_2$ сегментів. Іншими словами гауссовий

ланцюг з N сегментів може бути поділений на дві частини n та $N - n$ сегментів.

Важливою особливістю даної моделі є наступне твердження: якщо гауссовий ланцюг складається з N сегментів, кожний з яких має середню довжину b , значення Nb не є контурною довжиною всього гауссовського ланцюга. Значення N довільне, а значення Nb залежить від його вибору. Отже при фіксованих кінцях ланцюга, збільшено значення N , траєкторія ланцюга стане більш детальною, відповідно довжина Nb збільшиться. Ця ситуація зображена на рисунку 1.6. Але відстань між кінцями ланцюга залишається незмінним. Позначимо $\mathbf{R} = r_N - r_0$. Згідно побудованої моделі $R_F^2 = D\mathbf{R} = Nb^2$ - не змінюється. Отже гауссовський ланцюг треба розглядати, як ланцюг з відстанню між кінцями \mathbf{R} та кількістю сегментів N , а ось значення вже кожний сегмент має середнє квадратичну довжину $\frac{R_F^2}{N}$.

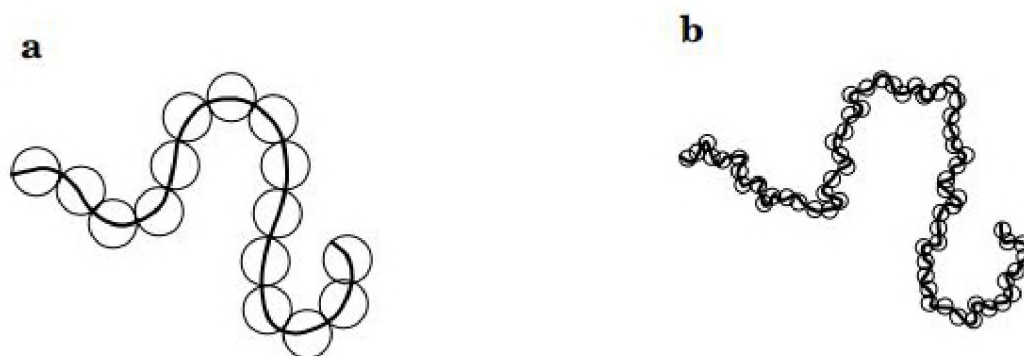


Рисунок 1.6 — Довжина контуру гауссового ланцюга залежить від кількості сегментів. Малюнок **b**, в порівнянні з малюнком **a**, має більш детальний контур, а тому й більш довгий. Проте відстань між кінцями однакова.

Отже, R_F є важливою характеристикою гауссовської моделі полімерного ланцюга. Також часто використовують таку характеристику, як радіус обертання R_g . Його квадрат визначається як середнє квадратична відстань між кульками та центром мас. Грубо кажучи, більша частина ланцюга знаходиться у сфері радіуса

R_g . Центр мас ланцюга визначається наступним чином:

$$r_G = \frac{1}{N+1} \sum_{i=0}^N r_i,$$

якщо всі кульки в моделі мають однакову масу та з'єднані безмасовими зв'язками.

Тоді

$$R_g^2 = \frac{1}{N+1} \sum_{i=0}^N M(r_i - r_G)^2.$$

Як випливає з назви, mR_g^2 - момент інерції обертання (m - маса молекули) цієї молекули навколо її центра мас.

Корисна наступна формула:

$$R_g^2 = \frac{1}{2(N+1)^2} \sum_{j,i=0}^N M(r_i - r_j)^2.$$

Ця формула вказує на те, що не обов'язково знати центр мас для подальшого обчислення радіуса обертання. Оскільки підсумовування по двом індексам i, j є іншим усередненням, можна сказати, що R_g^2 складає половину середнє квадратичної довжини між двома мономерами на ланцюгу.

Доведемо цю формулу:

$$\begin{aligned} \sum_{j,i=0}^N (r_i - r_j)^2 &= \sum_{j,i=0}^N [(r_i - r_G) - (r_j - r_G)]^2 = \\ &= \sum_{j,i=0}^N (r_i - r_G)^2 - 2 \sum_{j,i=0}^N (r_i - r_G)(r_j - r_G) + \sum_{j,i=0}^N (r_j - r_G)^2 = \\ &= 2(N+1) \sum_{j,i=0}^N (r_i - r_G)^2 - 2 \left[\sum_{i=0}^N (r_i - r_G) \right]^2 = 2(N+1) \sum_{j,i=0}^N (r_i - r_G)^2. \end{aligned}$$

У наведених вище перетворення не використовувалися данні певних моделей, тобто даний вираз справедливий для будь-якого полімерного ланцюга.

Замітимо, що значення R_F визначено лише для лінійних ланцюгів, в той час як R_g може бути використано для будь-якої архітектури, наприклад, таких як розгалужений ланцюг. В цьому сенсі, R_g є більш універсальною характеристикою.

Надалі будемо використовувати вінеровський процес для моделювання лінійного полімера. Тобто випадковим процесом $\{w(t), t \geq 0\}$ з наступними характеристиками:

- 1) $w(0) = 0$, м.н.;
- 2) $w(\cdot)$ - процес з незалежними приростами;
- 3) $w(t) - w(s)$ має нормальний розподіл з нульовим середнім та дисперсією $t - s$, для всіх $t > s \geq 0$ [2].

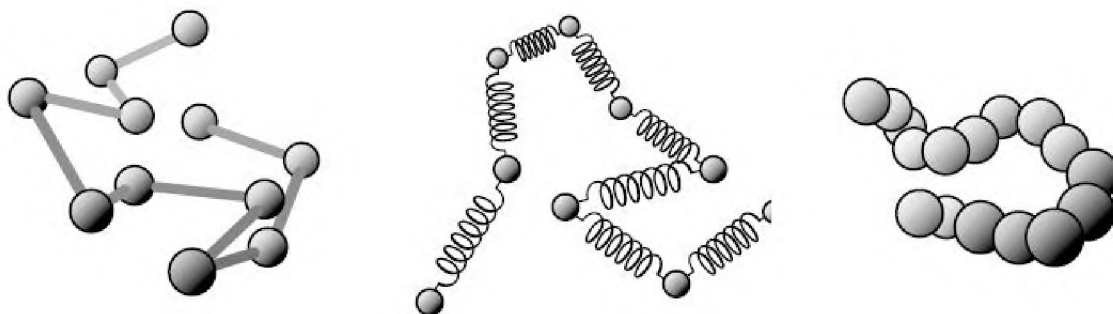
Модель гауссового ланцюга дозволяє зрозуміти основні закономірності поведінки довгих ланцюгових полімерів, зумовлені проявом теплових флуктуацій вигину і «заплутуванням» ланцюга в клубок.

1.5 Фізичні моделі

Для визначення залежності багатьох фізичних властивостей від довжини полімерного ланцюга, або концентрації полімера використовують інші підходи для моделювання. Приклади таких моделей наведено на рисунку 1.7.

В моделі кулька-стержень (рисунок 1.7а) полімерний ланцюг зображається, як набір кульок, що з'єднані між собою стержнями. Отримані пари кулька-стержень називаються сегментами, тобто сегмент - найменша одиниця ланцюга. Дана модель має декілька варіацій:

- 1) з урахуванням діаметра кульки та товщини стержня (окремий випадок, ко-



(а) Модель кулька-стержень. (б) Модель кулька-пружина. (в) Модель "намисто".

Рисунок 1.7 — Різні моделі для лінійного ланцюгового полімеру в безперервному просторі.

ли діаметр кульки дорівнює 0, тоді сегментом є стержень);

- 2) з урахуванням обмеження кута між двома сусідніми стержнями;
- 3) з урахуванням обмеження кута крутіння (двогранного кута).

У моделі "намисто" (рисунок 1.7в) кульки (бусини) завжди дотикаються до двох сусідніх кульок. Ця модель, по суті, являє собою модель кулька-стержень, в якій довжина стержня дорівнює діаметру кульки. Кулька завжди має позитивний діаметр. Як і в моделі кулька-стержень, ми можемо обмежити кут зв'язку або двогранний кут.

У моделі кулька-пружина (рисунок 1.7б) цілий ланцюг представлений набором кульок, що зв'язані між собою пружинами. Довжина рівноваги кожної пружини дорівнює нулю. Така модель зручно описує рух різних частин ланцюга. Така модель тісно пов'язана з статистичною моделлю - Вінеровським процесом, тому розглянемо її детальніше.

Нехай фізична модель складається з N незалежних пружин з коефіцієнтом пружності k та кульок, що знаходяться в точках r_0, r_1, \dots, r_N . Потенційна енергія всього ланцюга U є потенційною енергією пружної деформації пружин:

$$U(r_0, r_1, \dots, r_N) = \frac{1}{2}k \sum_{n=1}^N (r_n - r_{n-1})^2.$$

Тоді розподіл Больцмана дає змогу порахувати ймовірність (ненормовану) виявити ланцюг у певній конформації r_0, r_1, \dots, r_N :

$$e^{-U(r_0, r_1, \dots, r_N)/k_B T} = \prod_{n=1}^N e^{-\frac{k}{2k_B T} (r_n - r_{n-1})^2},$$

де $k = 1,38 \cdot 10^{-23}$ Дж/К - постійна Больцмана, T - температура. Кожний множник $e^{-\frac{k}{2k_B T} (r_n - r_{n-1})^2}$ щільність розподілу Гауса для кожного сегменту.

Нехай

$$b^2 = \frac{3k_B T}{k},$$

тоді коефіцієнт пружності пружин дорівнює $\frac{3k_B T}{b^2}$, де b^2 - середнє квадратична довжина пружини. Тепер можемо переписати розподіл Больцмана, як вираз який не містить параметр k [3]:

$$e^{-U(r_0, r_1, \dots, r_N)/k_B T} = e^{-\frac{3}{2b^2} \sum_{n=1}^N (r_n - r_{n-1})^2}.$$

Отже, положення кожного сегмента ланцюга, в залежності від положення попереднього, задається гауссовським розподілом, що узгоджується з гауссовським ланцюгом описаним вище.

Висновок до розділу 1

В першій частині була розглянута класифікація полімерних молекул за геометрією скелета; наведені основні моделі, які використовуються при дослідженні полімерів.

Основна увага була приділена гауссовій моделі лінійного полімерного ланцюга, зокрема її було виведено з дискретної моделі полімера - випадкового блукання. Також розглянуті основні характеристики гауссової моделі.

2 ГЕОМЕТРИЧНІ ХАРАКТЕРИСТИКИ ПОЛІМЕРІВ

Для достатньо довгих полімерних молекул відмінності від поведінки ідеального ланцюга стають істотними через наявність ефекту виключеного об'єму. Більш точною моделлю, яка описує конформацію полімерної молекули, є модель ланцюга без самоперетинів. Заборона на самоперетини призводить до того, що частина просторових конфігурацій, дозволених для ідеального (гауссового) ланцюга, тобто траєкторії з самоперетином, заборонені і виключаються з статистичного ансамблю, за яким відбувається усереднення всіх конформаційних характеристик. Інтуїтивно зрозуміло, що більш компактні конформації ідеального ланцюга включають в себе більше самоперетинів. Тому в разі заборони самоперетинів набір дозволених конформацій виявляється збагачений більш розрідженими структурами, що призводить до збільшення середніх розмірів полімерного ланцюга, в порівнянні з розмірами ідеального. Різниця в характерних розмірах ідеального та ланцюга без самоперетинів невелика для коротких і жорстких ланцюгів, але виявляється значним при великій довжині (великих молекулярних масах). Тому облік кількості самоперетинів у траєкторії випадкового процесу має реальне прикладне значення. Для дослідження цієї характеристики було запропоновано ввести поняття локального часу самоперетину, що виникає при дослідженні геометричних властивостей траєкторій випадкових процесів [1].

2.1 Локальний час самоперетину

Нехай $\{x(t), t \in [0, 1]\}$ - випадковий процес зі значеннями в \mathbb{R}^2 . Для того щоб зрозуміти, що могло б служити геометричними характеристиками траєкторії процесу x , розглянемо поведінку площі ε -околиці цієї траєкторії, та порівняємо отриманий вираз з теоремою Штейнера-Мінковського для випуклого тіла з

простору \mathbb{R}^d . Визначим наближення:

$$\Gamma_{\varepsilon}^n = \bigcup_{k=1}^n B(x(\frac{k}{n}), \varepsilon).$$

Зрозуміло, що площа ε -околиці траєкторії процесу x наближається множиною $\{|\Gamma_{\varepsilon}^n|\}$. Тобто $|\Gamma_{\varepsilon}^n| \rightarrow |\Gamma_{\varepsilon}|$, при $n \rightarrow +\infty$.

Згідно формули включення-виключення:

$$\begin{aligned} \left| \bigcup_{k=1}^n B(x(\frac{k}{n}), \varepsilon) \right| &= \pi n \varepsilon^2 - \sum_{k_1 < k_2} \left| B(x(\frac{k_1}{n}), \varepsilon) \cap B(x(\frac{k_2}{n}), \varepsilon) \right| + \\ &+ \sum_{k_1 < k_2 < k_3} \left| B(x(\frac{k_1}{n}), \varepsilon) \cap B(x(\frac{k_2}{n}), \varepsilon) \cap B(x(\frac{k_3}{n}), \varepsilon) \right| - \\ &\dots + (-1)^n \left| \bigcap_{k=1}^n B(x(\frac{k}{n}), \varepsilon) \right| \end{aligned} \quad (2.1)$$

Введемо позначення. Нехай функція $b_{\varepsilon}^n(x_1, \dots, x_n) = \left| \bigcap_{k=1}^n B(x_k, \varepsilon) \right|$, при $x_1, x_2, \dots, x_n \in \mathbb{R}^2$. Замітимо що, якщо зробити перенос системи координат та змінити масштаб, отримаємо наступні перетворення:

$$\begin{aligned} b_{\varepsilon}^n(x_1, \dots, x_n) &= b_{\varepsilon}^n(0, x_2 - x_1, \dots, x_n - x_1) = p_{\varepsilon}^{n-1}(x_2 - x_1, \dots, x_n - x_1) = \\ &= \varepsilon^2 p_1^{n-1}\left(\frac{x_2 - x_1}{\varepsilon}, \dots, \frac{x_n - x_1}{\varepsilon}\right), \end{aligned}$$

де $p_{\varepsilon}^{n-1}(y_1, \dots, y_{n-1}) = |B(0, \varepsilon) \cap B(y_1, \varepsilon) \cap B(y_1 + y_2, \varepsilon) + \dots + B(\sum_{i=1}^n y_i, \varepsilon)|$.

Нехай c_{n-1} - коефіцієнт нормування, тобто:

$$\int_{\mathbb{R}^{2(n-1)}} c_{n-1} p_1^{n-1}(y_1, \dots, y_{n-1}) dy_1 \dots dy_n = 1$$

Покладемо

$$\tilde{p}_\varepsilon^{n-1}(y_1, \dots, y_{n-1}) = \frac{c_{n-1}}{\varepsilon^{2(n-1)}} p_1^{n-1}\left(\frac{y_1}{\varepsilon}, \dots, \frac{y_{n-1}}{\varepsilon}\right).$$

Для будь-якої неперервної та обмеженої функції $\phi : \mathbb{R}^{2(n-1)} \rightarrow \mathbb{R}$ має місце співвідношення:

$$\int_{\mathbb{R}^{2(n-1)}} \tilde{p}_\varepsilon^{n-1}(y) \phi(y) dy \rightarrow \phi(0), \text{ при } \varepsilon \rightarrow 0+. \quad (2.2)$$

Така збіжність еквівалентна збіжності до дельта функції, тобто $\tilde{p}_\varepsilon^{n-1} \rightarrow \delta$, при $\varepsilon \rightarrow 0+$.

Тоді вираз 2.1 можна переписати наступним чином:

$$\begin{aligned} \left| \bigcup_{k=1}^n B(x(\frac{k}{n}), \varepsilon) \right| &= \pi n \varepsilon^2 - \sum_{k_1 < k_2} \varepsilon^2 p_1^1 \left(\frac{x(\frac{k_2}{n}) - x(\frac{k_1}{n})}{\varepsilon} \right) + \\ &+ \sum_{k_1 < k_2 < k_3} \varepsilon^2 p_1^2 \left(\frac{x(\frac{k_2}{n}) - x(\frac{k_1}{n})}{\varepsilon}, \frac{x(\frac{k_3}{n}) - x(\frac{k_2}{n})}{\varepsilon} \right) - \\ &- \dots + (-1)^n p_1^{n-1} \left(\frac{x(\frac{2}{n}) - x(\frac{1}{n})}{\varepsilon}, \dots, \frac{x(\frac{1}{n}) - x(\frac{n-1}{n})}{\varepsilon} \right) \end{aligned} \quad (2.3)$$

З урахуванням 2.2 окремий коефіцієнт при ε у виразі 2.3, будучи нормованим

$$\sum_{k_1 < \dots < k_m} \frac{c_{m-1}}{\varepsilon^{2(m-1)}} p_1^{m-1} \left(\frac{x(\frac{k_2}{n}) - x(\frac{k_1}{n})}{\varepsilon}, \dots, \frac{x(\frac{k_m}{n}) - x(\frac{k_{m-1}}{n})}{\varepsilon} \right) \frac{1}{n^{m-1}}$$

міг би збігатися при $\varepsilon \rightarrow 0+, n \rightarrow +\infty$ до формального інтегралу виду

$$\int_{\Delta_m} \prod_{i=1}^{m-1} \delta_0(x(t_{i+1}) - x(t_i)) d\bar{t}, \quad (2.4)$$

де $\Delta_m = \{0 \leq t_1 < t_2 < \dots < t_m \leq 1\}$.

Згідно теореми Штейнера-Мінковського об'єм ε -околиці випуклого тіла A у просторі \mathbb{R}^d можна представити у вигляді многочлена від ε степені d , в якому кожний коефіцієнт при ε є геометричною характеристикою тіла A (наприклад, об'ємом, площею поверхні)[4]. Отже отриманий вираз 2.4 є геометричною характеристикою траєкторії випадкового процесу x .

Розглянемо детальніше вираз 2.4 для вінеровського процесу $\{w(t), t \in [0, 1]\}$ заданого в \mathbb{R}^2 .

Визначення 2.1 [5] *Випадкова величина:*

$$T_k^w = \int_{\Delta_k} \prod_{i=1}^{k-1} \delta_0(w(t_{i+1}) - w(t_i)) d\bar{t},$$

де $\Delta_k = \{0 \leq t_1 < t_2 < \dots < t_k \leq 1\}$, називається k -кратним локальним часом самоперетину вінеровського процесу.

Для двукратного локального часу самоперетину T_2^w розглянемо його апроксимуюче сімейство випадкових величин.

$$T_{\varepsilon, 2}^w = \int_{\Delta_2} f_{\varepsilon}(w(t_2) - w(t_1)) d\bar{t},$$

де $f_{\varepsilon}(x) = \frac{1}{2\pi\varepsilon} e^{-\frac{\|x\|^2}{2\varepsilon}}$, $\varepsilon > 0, x \in \mathbb{R}^d$.

Лема 2.1 *Виконується наступна збіжність:*

$$f_\varepsilon \rightarrow \delta, \text{ при } \varepsilon \rightarrow 0$$

Доведення. Для доведення збіжності к дельта функції необхідно довести наступне:

$$\int_{\mathbb{R}^n} f_\varepsilon(x)g(x)dx \rightarrow g(0), \text{ при } \varepsilon \rightarrow 0, \quad (2.5)$$

для будь-якої неперервної обмеженої функції g .

Розглянемо послідовність нормально розподілених випадкових величин $\{\xi_\varepsilon\}_{\varepsilon>0}$, де $\xi_\varepsilon \sim N(0, \varepsilon I)$, тоді відповідні щільності розподілу:

$$f_\varepsilon(x) = \frac{1}{2\pi\varepsilon} e^{-\frac{\|x\|^2}{2\varepsilon}}$$

Так як характеристичні функції даної послідовності випадкових величин збігаються до характеристичної функції виродженної випадкової величини:

$$\phi_{\xi_\varepsilon}(t) = e^{-\frac{\|t\|^2\varepsilon}{2}} \rightarrow 1, \text{ при } \varepsilon \rightarrow 0.$$

Значить виконується збіжність за розподілом:

$$\xi_\varepsilon \xrightarrow{d} 0, \text{ при } \varepsilon \rightarrow 0.$$

А значить виконується збіжність математичних сподівань:

$$Mg(\xi_\varepsilon) \rightarrow g(0), \text{ при } \varepsilon \rightarrow 0, \forall g \in C_b(\mathbb{R}^2)$$

Що доводить збіжність 2.5.

□

З 2.1 випливає, що границя послідовності величин $T_{\varepsilon,2}^w$ може бути величина T_2^w , якщо вона існує.

Лема 2.2 $MT_{\varepsilon,2}^w \rightarrow +\infty$, при $\varepsilon \rightarrow 0+$.

Доведення. Оскільки $|f_\varepsilon(x)| \leq 1$, тоді за теоремою Фубіні, внесемо математичне сподівання під інтеграл:

$$M \left[\int_0^t \int_{t_1}^t f_\varepsilon(w(t_2) - w(t_1)) dt_2 dt_1 \right] = \int_0^t \int_{t_1}^t M[f_\varepsilon(w(t_2) - w(t_1))] dt_2 dt_1.$$

Так як визначена раніше функція f_ε - симетрична, та є щільністю нормального розподілу, тоді має місце наступне перетворення:

$$Mf_\varepsilon(w(t_2) - w(t_1)) = \int_{\mathbb{R}^2} f_\varepsilon(x) f_{t_2-t_1}(x) dx = \int_{\mathbb{R}^2} f_\varepsilon(0-x) f_{t_2-t_1}(x) dx.$$

Нехай випадкові величини $\xi \sim N(0, \varepsilon I)$ та $\eta \sim N(0, (t_2 - t_1)I)$ незалежні. Щільність розподілу суми незалежних випадкових величин $(\xi + \eta)$ виражається наступним чином:

$$g_{\xi+\eta}(u) = \int_{\mathbb{R}^2} f_\varepsilon(u-x) f_{t_2-t_1}(x) dx.$$

Отже, $Mf_\varepsilon(w(t_2) - w(t_1)) = g_{\xi+\eta}(0)$. При цьому $\xi + \eta$ має нормальний розподіл з параметрами 0 та $(\varepsilon + t_2 - t_1)I$ відповідно, а значить:

$$Mf_\varepsilon(w(t_2) - w(t_1)) = \frac{1}{2\pi(\varepsilon + t_2 - t_1)}.$$

Так як виконується збіжність:

$$\frac{1}{2\pi(\varepsilon + t_2 - t_1)} \rightarrow +\infty \text{ при } \varepsilon \rightarrow 0+,$$

тоді за теоремою про мажоровану збіжність, виконується збіжність математичного сподівання:

$$MT_{\varepsilon,2}^w = \int_0^t \int_{t_1}^t \frac{1}{2\pi(\varepsilon + t_2 - t_1)} dt_2 dt_1 \rightarrow +\infty \text{ при } \varepsilon \rightarrow 0+.$$

□

Згідно леми 2.2, $T_{\varepsilon,k}^w$ не має границі в $L_1(\mathbb{R}^2)$, а отже й в $L_2(\mathbb{R}^2)$, оскільки $M[T_{\varepsilon,k}^w]^2 \geq [MT_{\varepsilon,k}^w]^2$. Тому розглядають апроксимуючу множину $T_{\varepsilon,k}^w$ з перенормуванням. Одним з прикладів є перенормування Розена, що має наступний вигляд:

$$L_{\varepsilon,k}^w = \int_{\triangle_k} \prod_{i=1}^{k-1} \{f_\varepsilon(w(t_{i+1}) - w(t_i))\} d\bar{t}, \quad (2.6)$$

де $\triangle_k = \{0 \leq t_1 \leq t_2 \leq \dots t_k \leq 1\}$, а для випадкової величини η вираз $\{\eta\}$ означає $\eta - M\eta$.

Такі випадкові величини збіжні. Тоді випадкова величина L_k^w , що є грани-

цею послідовності випадкових величин $L_{\varepsilon,k}^w$ при $\varepsilon \rightarrow 0+$, називається перенормованим по Розену локальним часом самоперетину кратності k для вінеровського процесу.

Теорема 2.1 [6] Існує $L_2 - \lim L_{\varepsilon,k}^w$, при $\varepsilon \rightarrow 0+$

Доведення. Для початку доведемо теорему для випадку $k = 2$, тобто покажемо, що існує $L_2 - \lim \int_{\Delta_2} \{f_\varepsilon(w(t_2) - w(t_1))\} d\bar{t}$ при $\varepsilon \rightarrow 0+$.

Для цього розглянемо перетворення Фур'є функції f_ε :

$$\hat{f}_\varepsilon(p) = \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}^2} f_\varepsilon(x) e^{-ixp} dx = \frac{1}{(2\pi)^2 \varepsilon} \int_{\mathbb{R}^2} e^{\frac{\|x\|^2}{2\varepsilon}} e^{-ixp} dx = \frac{1}{2\pi} e^{\frac{\varepsilon \|p\|^2}{2}}.$$

За допомогою отриманого перетворення, запишемо представлення функції f_ε у вигляді інтегралу, та будемо його використовувати далі в доведенні:

$$f_\varepsilon(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}^2} \hat{f}_\varepsilon(x) e^{ixp} dp = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{\mathbb{R}^2} e^{\frac{\varepsilon \|p\|^2}{2}} e^{ixp} dx.$$

Покажемо, що $M(L_{\varepsilon,2}^w)^2$ - обмежена величина, де

$$M(L_{\varepsilon,2}^w)^2 = \frac{1}{4\pi^2} \int_{\Delta_2 \times \Delta_2} \int_{\mathbb{R}^4} e^{-\varepsilon(|p|^2 + |q|^2)/2} M\{e^{ip(w(t_2) - w(t_1))}\} \{e^{iq(w(s_2) - w(s_1))}\} dp dq d\bar{t} d\bar{s} \quad (2.7)$$

в цьому випадку математичне сподівання можна вносити під знак інтегралу оскільки виконується умова теореми Фубіні, а саме:

$$M(L_{\varepsilon,2}^w)^2 \leq \frac{1}{\pi^2} \int_{\mathbb{R}^4} e^{-\varepsilon(|p|^2 + |q|^2)/2} dp dq < +\infty.$$

Відомо, що

$$\begin{aligned} & M\{e^{ip(w(t_2)-w(t_1))}\}\{e^{iq(w(s_2)-w(s_1))}\} = \\ & = Me^{ip(w(t_2)-w(t_1))}e^{iq(w(s_2)-w(s_1))} - Me^{ip(w(t_2)-w(t_1))}Me^{iq(w(s_2)-w(s_1))}, \end{aligned} \quad (2.8)$$

з урахуванням того, що для випадкової величини η : $\{\eta\} = \eta - M\eta$.

Значення такого математичного сподівання залежить від відносної позиції змінних s_1, s_2, t_1, t_2 . Тому розглянемо три випадки:

Випадок 1: Нехай інтервали $[s_1, s_2]$ та $[t_1, t_2]$ - не перетинаються. В такому випадку $w(s_2) - w(s_1), w(t_2) - w(t_1)$ - незалежні, так як вінеровський процес має незалежні прирости, а отже $M\{e^{ip(w(t_2)-w(t_1))}\}\{e^{iq(w(s_2)-w(s_1))}\}$ дорівнює нулю, тобто $M(L_{\varepsilon,2}^w)^2 = 0$.

Випадок 2: Нехай тепер інтервали $[s_1, s_2]$ та $[t_1, t_2]$ перекриваються, але не містять друг друга. Припустимо, що змінні s_1, s_2, t_1, t_2 мають наступний порядок $s_1 < t_1 < s_2 < t_2$, тоді математичне сподівання 2.8 приймає вид:

$$\begin{aligned} & M\{e^{ip(w(t_2)-w(t_1))}\}\{e^{iq(w(s_2)-w(s_1))}\} = \\ & = Me^{ip(w(t_2)-w(s_2))+i(p+q)(w(s_2)-w(t_1))+iq(w(t_1)-w(s_1))} - Me^{ip(w(t_2)-w(t_1))}Me^{iq(w(s_2)-w(s_1))} = \\ & = \phi_{w(t_2-s_2)}(p) \cdot \phi_{w(s_2-t_1)}(p+q) \cdot \phi_{w(t_1-s_1)}(q) - \phi_{w(t_2-t_1)}(p) \cdot \phi_{w(s_2-s_1)}(q) = \\ & = e^{-\|q\|^2 l_1/2 - \|p+q\|^2 l_2/2 - \|p\|^2 l_3/2} - e^{-\|q\|^2 l_1/2 - (\|q\|^2 + \|p\|^2) l_2/2 - \|p\|^2 l_3/2}, \end{aligned}$$

де $l_1 = t_1 - s_1$, $l_2 = s_2 - t_1$, $l_3 = t_2 - s_2$, а $\phi_{w(t)}$ - відповідно характеристична функція $w(t)$.

Застосуємо нерівність $\frac{1}{2} \|p + q\|^2 \leq \|p\|^2 + \|q\|^2$, та отримаємо:

$$\begin{aligned} M\{e^{ip(w(t_2)-w(t_1))}\}\{e^{iq(w(s_2)-w(s_1))}\} &\leq \\ &\leq 2e^{-\|q\|^2 l_1/2 - \|p+q\|^2 l_2/2 - \|p\|^2 l_3/2}. \end{aligned}$$

Також, далі застосуємо іншу нерівність, а саме:

$$\int_0^T e^{-v^2 s} ds \leq \frac{c}{1+v^2}, \quad (2.9)$$

де c - деяка константа.

Отримаємо, що

$$M(L_{\varepsilon,2}^w)^2 \leq C \int_{\mathbb{R}^4} e^{-\varepsilon(|p|^2+|q|^2)/2} \cdot (1 + \|q\|^2)^{-1} \cdot (1 + \|p+q\|^2)^{-1} \cdot (1 + \|p\|^2)^{-1} dp dq.$$

Отже величина $M(L_{\varepsilon,2}^w)^2$ є обмеженою. Значить за теоремою про мажорвану збіжність існує границя в L_2 .

Випадок 3: Один з інтервалів $[s_1, s_2]$ та $[t_1, t_2]$ повністю містить інший. Для визначеності, нехай s_1, s_2, t_1, t_2 мають наступний порядок $t_1 < s_1 < s_2 < t_2$.

Проведемо аналогічні перетворення, як у випадку 2, та отримаємо наступну рівність:

$$\begin{aligned} M\{e^{ip(w(t_2)-w(t_1))}\}\{e^{iq(w(s_2)-w(s_1))}\} &= \\ &= e^{-\|p\|^2 l_1/2 - \|p+q\|^2 l_2/2 - \|p\|^2 l_3/2} - e^{-\|p\|^2 l_1/2 - (\|q\|^2 + \|p\|^2) l_2/2 - \|p\|^2 l_3/2} = \\ &= e^{-\|p\|^2 l_1/2} (e^{-\|p+q\|^2 l_2/2} - e^{-(\|q\|^2 + \|p\|^2) l_2/2}) e^{-\|p\|^2 l_3/2}, \end{aligned}$$

де $l_1 = s_1 - t_1$, $l_2 = s_2 - s_1$, $l_3 = t_2 - s_2$.

Якщо використовувати такі ж нерівності, що й у випадку 2, отримаємо необмежену мажоранту, отже скористаємося іншим методом, а саме, проінтегруємо отримане значення по змінній q .

$$\begin{aligned}
& \int_{\mathbb{R}^2} e^{-\varepsilon \|q\|^2/2} (e^{-\|p+q\|^2 l_2/2} - e^{-(\|q\|^2 + \|p\|^2) l_2/2}) dq = \\
& = e^{-\|p\|^2 l_2/2} \int_{\mathbb{R}^2} (e^{-pq l_2} - 1) e^{-\|q\|^2 (l_2 + \varepsilon)/2} dq = \\
& = e^{-\|p\|^2 l_2/2} \int_{\mathbb{R}^2} \left[e^{-\left(\sqrt{\frac{l_2 + \varepsilon}{2}} q + p l_2 \sqrt{\frac{1}{2(l_2 + \varepsilon)}}\right)^2} \cdot e^{p^2 \frac{l_2^2}{2(l_2 + \varepsilon)}} - e^{-\|q\|^2 (l_2 + \varepsilon)/2} \right] dq = \\
& = e^{-\|p\|^2 l_2/2} \left[\frac{e^{p^2 \frac{l_2^2}{2(l_2 + \varepsilon)}} - 1}{l_2 + \varepsilon} \right] = F_\varepsilon(p, l) \geq 0.
\end{aligned} \tag{2.10}$$

Отримана функція F_ε монотонно спадає по ε , а значить виконується нерівність:

$$F_\varepsilon(p, l) \leq F_0(p, l) = e^{-\|p\|^2 l_2/2} \left[\frac{e^{p^2 \frac{l_2^2}{2}} - 1}{l_2} \right] = \frac{1 - e^{-p^2 l_2/2}}{l_2} \leq C \|p\|^{2\delta} l_2^{-1+\delta}, \tag{2.11}$$

для будь-якого $\delta \in (0, 1)$.

Використаємо нерівність 2.9, отримаємо необхідну мажоранту:

$$\begin{aligned}
M(L_{\varepsilon, 2}^w)^2 & \leq \frac{1}{4\pi^2} C \int_{\Delta_2 \times \Delta_2} \int_{\mathbb{R}^2} e^{-\|p\|^2 \varepsilon/2} \cdot e^{-\|p\|^2 l_1/2} \cdot e^{-\|p\|^2 l_3/2} \cdot \|p\|^{2\delta} l_2^{-1+\delta} dp dt ds \leq \\
& \leq \tilde{C} \int_{\mathbb{R}^2} (1 + \|p\|^2)^{-2} \|p\|^{2\delta} dp.
\end{aligned}$$

При $\delta = \frac{1}{2}$ ця мажоранта є скінченною, тому як й у випадку 2 за теоремою про мажоровану збіжність існує границя в L_2 .

Розглянемо загальний випадок, тобто доведемо збіжність k -кратного перенормованого локального часу самоперетину. Тоді вираз 2.7 переписеться насту-

ПНИМ ЧИНОМ:

$$MI_{\varepsilon}^k(\triangle_k) = \iint_{\triangle_k \times \triangle_k} \iint G_{\varepsilon}(p, q) M\left(\prod_{j=1}^{n-1} \{e^{ip_j(w(t_{j+1})-w(t_j))}\} \cdot \{e^{iq_j(w(s_{j+1})-w(s_j))}\}\right) dp dq d\bar{t} d\bar{s}, \quad (2.12)$$

де $G_{\varepsilon}(p, q) = e^{-\varepsilon(\Sigma(\|p_j\|^2 + \|q_j\|^2))/2}$.

Множину $\triangle_k \times \triangle_k$ можна розбити на скінченну кількість підмножин, що неперетинаються, на кожному з яких буде виконуватись певний порядок. Тому перейдемо до змінних інтегрування r_1, \dots, r_{2n-1} , таких що $0 < r_1 < \dots < r_{2n-1} < 1$. Назвемо множину яка буде задовільняти такій перестановці A . Так кожній змінній s_j або t_j ставиться у відповідність одна з координат r_k .

Назовемо інтервал $[r_j, r_{j+1}]$ - ізолюваним, якщо:

$$[r_j, r_{j+1}] = [s_l, s_{l+1}] \text{ для деякого } l,$$

або

$$[r_j, r_{j+1}] = [t_m, t_{m+1}] \text{ для деякого } m.$$

Розглянемо наступні множини індексів:

$$I = \{i | [r_i, r_{i+1}] - \text{ізолюваний}\},$$

$$I_s = \{l | [s_l, s_{l+1}] - \text{ізолюваний}\},$$

$$I_t = \{k | [t_k, t_{k+1}] - \text{ізолюваний}\},$$

тобто $I = I_s \cup I_t$. При цьому, якщо індекси 1 або $2n-1$ належать I , тоді інтеграл, що досліджується, по множині A буде дорівнювати 0.

Опустимо дужки, $\{X\} = X - MX$, для всіх не ізольованих інтервалів:

$$\begin{aligned} & \iint_A G_\varepsilon(p, q) M e^{i \sum_{I_t^c} p_j (w(t_{j+1}) - w(t_j)) + \sum_{I_s^c} q_j (w(s_{j+1}) - w(s_j))} \\ & \cdot \prod_{I_t} \{e^{ip_j (w(t_{j+1}) - w(t_j))}\} \prod_{I_s} \{e^{iq_j (w(s_{j+1}) - w(s_j))}\} dp dq d\bar{t} d\bar{s}. \end{aligned}$$

Згідно перетворення Абеля:

$$\sum_{I_t^c} p_j (w(t_{j+1}) - w(t_j)) + \sum_{I_s^c} q_j (w(s_{j+1}) - w(s_j)) = \sum_{i=1}^{2n-1} u_j (w(r_{i+1}) - w(r_i)), \quad (2.13)$$

де u_j - лінійна комбінація коефіцієнтів $\{p_i\}$ та $\{s_i\}$. Більш точно, якщо $i = 1, 2n - 1$ або $i \in I$, тоді u_i дорівнює або p_j або q_j . Інакше, u_i є сумою одного p_j та одного q_k .

Введемо нові позначення. Якщо $i \in I$ та $[r_i, r_{i+1}] = [s_l, s_{l+1}]$, для деякого l , тоді $v_i = q_l$, якщо $i \notin I$ та $[r_i, r_{i+1}] = [t_m, t_{m+1}]$, для деякого m , тоді $v_i = p_m$. Коефіцієнт v_i назовемо ізольованим. Тоді математичне очікування 2.12 прийме вид:

$$\iint_A G_\varepsilon(p, q) e^{i \sum_{I^c} \|u_j\|^2 l_j} \cdot \prod_I (e^{-\|u_j + v_j\|^2 l_j / 2} - e^{-(\|u_j\|^2 + \|v_j\|^2) l_j / 2}) dp dq d\bar{t} d\bar{s},$$

де $l_i = r_{i+1} - r_i$ - довжина i -го інтервалу. Далі, проінтегруємо по ізольованій змінній та згідно 2.10 отримаємо:

$$\iint_A \int_{\mathbb{R}^4} G_\varepsilon(\tilde{p}, \tilde{q}) e^{i \sum_{I^c} \|u_j\|^2 l_j} \cdot \prod_I F_\varepsilon(u_j, l_j) d\tilde{p} d\tilde{q} d\bar{t} d\bar{s}, \quad (2.14)$$

змінні \tilde{p}, \tilde{q} позначають решту коефіцієнтів, тобто не ізольованих.

Замітимо, що функція F_ε - невід'ємна. Скористаємося нерівностями 2.9 та

2.11, отримаємо границю інтеграла 2.14:

$$\iint \prod_{I^c} (1 + \|u_j\|^2)^{-1} \prod_I \|u_j\|^{2\delta} d\tilde{p} d\tilde{q}. \quad (2.15)$$

Згідно з описом значень $\{u_i\}_{i \in I^c}$, наведеного після рівності 2.13, ця множина містить в собі множину $\{u_j\}_{j \in I}$. Виберемо $\delta > 0$ достатньо маленьким, тоді 2.15 можна обмежити наступним інтегралом:

$$\iint \prod_{I^c} (1 + \|u_j\|^2)^{-1+\beta} d\tilde{p} d\tilde{q}. \quad (2.16)$$

Кожна неізолювана змінна з'являється як мінімум в двох (не обов'язково поспіль) множниках в інтегралі 2.16, в якості одного з доданків в u_k . Змінні, які з'являється один раз є ізолюваними. Якщо неізолювана змінна з'являється більш ніж в двох множниках - наприклад, u_i, u_j, u_k - тоді інший доданок у u_i є ізолюваною змінною. Таке трапляється при наявності вкладених інтервалів, тобто при наявності ізолюваних інтервалів. Для розуміння, розглянемо приклад, нехай змінні t_1, t_2, s_1, s_2 мають наступний порядок: $t_1 < s_1 < s_2 < t_2$, в такому випадку перетворення 2.13 має наступний вигляд:

$$p_1(t_2 - t_1) = p_1(t_2 - s_3) + p_1(s_2 - s_1) + p_1(s_1 - t_1).$$

Тобто змінна p_1 з'являється у трьох множниках, один з яких відповідає ізолюваному інтервалу.

Підсумок цих міркувань наступний: якщо потужність множини I^c дорівнює k , тоді будь-які $k - 1$ вектора з множини $\{u_i\}_{i \in I^c}$ будуть охоплювати множину неізолюваних змінних (як і раніше u_1, u_{2n-1} дорівнюють неізолюваним змінним).

Використаємо нерівність Гельдера для знаходження обмеження 2.16.

$$\begin{aligned} \iint \prod_{I^c} (1 + \|u_j\|^2)^{-1+\beta} d\tilde{p}d\tilde{q} &= \iint \prod_{i \in I^c} \left[\prod_{I^c, j \neq 1} (1 + \|u_j\|^2)^{-1+\beta} \right]^{\frac{1}{k-1}} d\tilde{p}d\tilde{q} \leq \\ &\leq \prod_{i \in I^c} \left\| \prod_{I^c, j \neq 1} (1 + \|u_j\|^2)^{-\frac{1-\beta}{k-1}} \right\|_k < +\infty, \end{aligned}$$

цей вираз скунченний, коли $\frac{1-\beta}{k-1} > 1$, тобто $\beta < \frac{1}{k}$. \square

Ще одним прикладом перенормування локального часу самоперетину є перенормування запропоноване Є.Б.Динкіним. Він розглянув наступний вираз:

$$\Lambda_{\varepsilon, k}^{\phi} = \int_{\triangle_k} \prod_{i=0}^{k-1} q_{\varepsilon}(w(s_{i+1}) - w(s_i)) \phi(s) ds,$$

де $\phi \in C(\triangle_k)$, а функція $q : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ задовільняє наступним умовам:

- 1) $\int_{\mathbb{R}^2} |\ln \|x\||^k q(x) dx < \infty$ для всіх $k \in \mathbb{N}_+$;
- 2) $\int_{\mathbb{R}^2} e^{\beta \|x\|} q(x) dx < \infty$ для деякого $\beta > 0$.

Нехай опратор $B_k^l : C(\triangle_k) \rightarrow C(\triangle_k)$ діє за правилом:

$$(B_k^l \phi)(s_1, \dots, s_l) = \sum_{\sigma} \phi(s_{\sigma_1}, \dots, s_{\sigma_k}).$$

Сумування проводиться по всім відображенням $\sigma : \{1, \dots, k\} \rightarrow \{1, \dots, l\}$, що $\sigma_i \leq \sigma_j$, для $i < j$. В якості перенормування величини $\Lambda_{\varepsilon, k}^{\phi}$ було запропоноване наступне:

$$T_{\varepsilon, k}^{\phi} = \sum_{l=1}^k \left(\frac{1}{2\pi} \ln \varepsilon \right)^{k-l} \int_{\triangle_l} \prod_{i=0}^{l-1} q_{\varepsilon}(w(s_{i+1}) - w(s_i)) B_k^l(\phi(s)) ds.$$

Позначемо через T_k^ϕ границю випадкових величин $T_{\varepsilon,k}^\phi$, при $\varepsilon \rightarrow 0+$, тоді випадкова величина T_k^1 є перенормованим локальним часом самоперетину кратності k для вінеровського процесу на площині. Таке перенормування є більш загальним, доведено що збіжність виконується у просторі L_p , $1 \leq p < +\infty$ на відміну від перенормування Розена, тому частіше використовується в дослідженнях геометричних характеристик полімерів.

Теорема 2.2 [7] Існує $L_p - \lim_{\varepsilon \rightarrow 0+} T_{\varepsilon,k}^\phi$, для всіх $1 \leq p < +\infty$.

2.2 Локальний час

Визначення 2.2 [8] Міра відвідування випадкового поля $Y(t) : \mathbb{R}_+^n \rightarrow \mathbb{R}^n$, $n \geq 1$ називається міра $\mu_B(A)$ наступного виду:

$$\mu_B(A) = \int_B \mathbf{1}_A(Y(t)) dt, \quad (2.17)$$

де $B \subset \mathbb{R}_+^n$, $A \subset \mathbb{R}^n$ - борелівські множини.

Отже, міра відвідування μ_B може бути визначена як міра Лебега λ_n на \mathbb{R}^n :

$$\mu_B(A) = \lambda_n(Y^{-1}(A) \cap B)$$

Якщо міра μ_B має щільність (тобто є абсолютно неперервною відносно міри Лебега), тоді існує функція $l(\cdot, B) \in L_1(\mathbb{R}^n)$, така що $\mu_B(A) = \int_A l(x, B) dx$. Ця щільність називається локальним часом поля Y . Неформально можна сказати, що $l(x, B)$ - це кількість часу в B , який провів процес поблизу точки x .

Отже для будь-якої обмеженої борелівської функції f виконувалась б рів-

ність:

$$\int_B f(Y(t))dt = \int_{\mathbb{R}^n} f(x)l(x,B)dx.$$

Нехай $\{w(t), t \in \mathbb{R}_+\}$ - вінеровський процес в $\mathbb{R}^d, d = 2, 3$. Визначим випадкове поле $Y(t) : \mathbb{R}_+^{n+1} \rightarrow \mathbb{R}^{dn}, n \geq 1$, наступним чином:

$$Y(t) = (w(t_2) - w(t_1), w(t_3) - w(t_2), \dots, w(t_{n+1}) - w(t_n)).$$

Позначимо $\mathbb{R}_{\leq}^{n+1} = \{(t_1, \dots, t_{n+1}) | 0 \leq t_1 \leq t_2 \leq \dots \leq t_{n+1}\}$.

Теорема 2.3 Для будь-якої обмеженої борелівської множини $B \subset \mathbb{R}_{\leq}^{n+1}$ випадкове поле Y має локальний час на B .

Доведення. Доведемо для випадку $d = 2$.

Розглянемо перетворення Фур'є міри відвідування випадкового поля Y :

$$\hat{\mu}_B(u) = \int_{\mathbb{R}^{2n}} \int_B \mathbf{1}_A(Y(t)) e^{-ixu} dt dx = \int_B e^{-i \sum_{j=1}^n u_j (w(t_{j+1}) - w(t_j))} dt,$$

де $u = (u_1, \dots, u_n) \in \mathbb{R}^{2n}$, відповідно $u_j = (u_j^1, u_j^2) \in \mathbb{R}^2, 1 \leq j \leq n$.

Для доведення достатньо показати, що математичне сподівання норми $\hat{\mu}_B$ в квадраті є скінченною величиною. Тоді існує функція $l \in L_2(\mathbb{R}^{2n})$, така що $\hat{\mu}_B(u) = \int_{\mathbb{R}^{2n}} e^{iux} l(x, B) dx$. При цьому $\hat{\mu}_B(u) = \int_{\mathbb{R}^{2n}} e^{iux} \mu_B(dx)$ - як перетворення Фур'є. А значить $\mu_B(dx) = l(x, B) dx$, тобто μ_B є асolutно неперервною відносно міри Лебега.

Отже розглянемо окремо величину $|\hat{\mu}_B(u)|^2$:

$$|\hat{\mu}_B(u)|^2 = \int_{B \times B} e^{-i \sum_{j=1}^n u_j (w(t_{j+1}) - w(t_j) - w(s_{j+1}) + w(s_j))} dt ds.$$

Введемо перепозначення: $s_j = t_{n+1+j}$, $1 \leq j \leq n$.

Множину $B \times B$ можна розбити на скінченну кількість підмножин, що не перетинаються, на кожному з яких буде виконуватись певний порядок змінних. Тобто нехай π - перестановка множини $\{1, 2, \dots, 2n+2\}$, така що:

$$\Delta(\pi) = \{t_{\pi(1)}, \dots, t_{\pi(2n+2)}\},$$

тоді $B \times B = \bigcup_{\pi} (B \times B \cap \Delta(\pi))$. Отже, достатньо розглянути одну з таких підмножин, та довести що

$$M \int_{\mathbb{R}^{2n}} |\hat{\mu}_B(u)|_{\Delta(\pi)}^2 du = M \int_{\mathbb{R}^{2n}} \int_{B \times B \cap \Delta(\pi)} e^{-i \sum_{j=1}^n u_j (w(t_{j+1}) - w(t_j) - w(s_{j+1}) + w(s_j))} dt ds du < +\infty.$$

Згідно перетворення Абеля

$$\sum_{i=0}^{2n+2} \tilde{u}_i w(t_i) = \sum_{i=0}^{2n+2} w(t_i) \left(\sum_{j=i}^{2n+2} \tilde{u}_j - \sum_{j=i+1}^{2n+2} \tilde{u}_j \right) = \sum_{i=1}^{2n+2} (w(t_i) - w(t_{i-1})) \sum_{j=i}^{2n+2} \tilde{u}_j,$$

де $t_0 = 0$, $w(0) = 0$, існує множина лінійних функцій $\{f_j(x) | f_j : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}\}_{0 \leq j \leq 2n+1}$,

таких що для $\tilde{f}_j(u) = (f_j(u^1), f_j(u^2))$ виконується рівність:

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^n u_j (w(t_{j+1}) - w(t_j) - w(t_{j+n+2}) + w(t_{n+1+j})) = \\ = \sum_{j=1}^n \tilde{f}_j(u) (w(t_{j+1}) - w(t_j)), \end{aligned}$$

при $t \in B \times B \cap \Delta(\pi)$.

Отже, математичне сподівання $|\hat{\mu}_B(u)|_{\Delta(\pi)}^2$ дорівнює наступному:

$$\int_{B \times B \cap \Delta(\pi)} Me^{i \sum_{j=1}^n \tilde{f}_j(u) (w(t_{j+1}) - w(t_j))} dt = \int_{B \times B \cap \Delta(\pi)} \prod_{j=0}^{2n+1} e^{-\frac{1}{2} \|\tilde{f}_j(u)\|^2 (t_{j+1} - t_j)} dt. \quad (2.18)$$

Так як функції $\{f_j(u)\}_{1 \leq j \leq 2n+1}$ - лінійні, розглянемо набір векторів $\{\bar{f}_j\}_{0 \leq j \leq 2n+1}$, таких що $f_j(u^1) = (\bar{f}_j, u^1)$, відповідно $\bar{f}_j \in \mathbb{R}^n$.

З набору $\{\bar{f}_j\}_{0 \leq j \leq 2n+1}$ можна вибрати n лінійно незалежних векторів. Припустимо що це не так, тобто $rank(\bar{f}_j, 0 \leq j \leq 2n+1) < n$. Значить рядки матриці $F = (\bar{f}_1, \dots, \bar{f}_{2n+1})$ є лінійно залежними, іншими словами існує ненульовий вектор $\bar{v} \in \mathbb{R}^n$, такий що $\forall j = \overline{1, 2n+1} (\bar{f}_j, \bar{v}) = 0$. Згадаємо, що вектори \bar{f}_j , такі що виконується рівність:

$$\sum_{j=1}^n u_j^1 [\mathbf{1}_{[t_{j+1}, t_j)}(r) - \mathbf{1}_{[t_{j+n+2}, t_{j+n+1})}(r)] = \sum_{j=0}^{2n+1} (\bar{f}_j, u^1) \mathbf{1}_{[t_{\pi(j+1)}, t_{\pi(j)})}(r), \quad t \in \Delta(\pi).$$

Отже, якщо $rank(\bar{f}_j, j = \overline{1, 2n+1}) < n$, тоді існує ненульовий вектор $\bar{v} \in \mathbb{R}^n$ такий що $\sum_{j=1}^n v_j [\mathbf{1}_{[t_{j+1}, t_j)}(r) - \mathbf{1}_{[t_{j+n+2}, t_{j+n+1})}(r)] = 0$, а таке можливо лише при $\bar{v} = \bar{0}$. Протиріччя.

Повернемося до інтегралу 2.18. Так як з множини $\{\bar{f}_j\}_{j=\overline{1, 2n+1}}$ можна вибрати n лінійно незалежних векторів (нехай такими є перші n векторів), тоді

якщо множина $B \subset t_1 < t_2 < \dots < t_n$,

$$\int_{B \times B \cap \Delta(\pi)} \int_{\mathbb{R}^{2n}} \prod_{j=0}^{2n+1} e^{-\frac{1}{2} \|\tilde{f}_j(u)\|^2 (t_{j+1}-t_j)} dudt < +\infty.$$

Для того що б це показати, при інтегруванні залишимо тільки перші n множника, та зробимо заміну змінних:

$$\bar{s}^i = A\bar{u}^i, \quad i = 1, 2,$$

де $\bar{s}^i \in \mathbb{R}^n$ - нові змінні; $A = (\bar{f}_1, \dots, \bar{f}_n)^T$ - матриця переходу до нових змінних, розміром $n \times n$; $\bar{u}^i \in \mathbb{R}^n$ - старі змінні.

Так як $\{\bar{f}_j\}_{0 \leq j \leq n-1}$ - лінійно незалежні вектори, тоді матриця A є невиродженою. З цього випливає, що й обернена матриця A^{-1} також є невиродженою, при цьому $\bar{u}^i = A^{-1}\bar{s}^i$, $i = 1, 2$. Якобіан переходу до нових змінних інтегрування $\det A^{-1} \neq 0$, значить інтеграл, що досліджується перепишеться наступним чином:

$$\begin{aligned} \int_{B \times B \cap \Delta(\pi)} \int_{\mathbb{R}^{2n}} \prod_{j=0}^{2n+1} e^{-\frac{1}{2} \|\tilde{f}_j(u)\|^2 (t_{j+1}-t_j)} dudt &< \int_{B \times B \cap \Delta(\pi)} \int_{\mathbb{R}^{2n}} \prod_{j=0}^{n-1} e^{-\frac{1}{2} \|\tilde{f}_j(u)\|^2 (t_{j+1}-t_j)} dudt = \\ &= \det A^{-1} \int_{B \times B \cap \Delta(\pi)} \int_{\mathbb{R}^{2n}} \prod_{j=0}^{n-1} e^{-\frac{1}{2} ((s_j^1)^2 + (s_j^2)^2) (t_{j+1}-t_j)} dsdt = \\ &= C \int_{B \times B \cap \Delta(\pi)} \int_{\mathbb{R}^{2n}} \prod_{j=0}^{n-1} s_j e^{-\frac{1}{2} (s_j)^2 (t_{j+1}-t_j)} dsdt, \end{aligned}$$

де C - деяка константа. Проінтегрував по змінним s, t отримаємо необхідне, а саме, що $M \int_{\mathbb{R}^{2n}} |\hat{\mu}_B(u)|_{\Delta(\pi)}^2 du < +\infty$. \square

Згідно теореми доведеної вище, випадковий процес $\{X(t) = w(t_2) - w(t_1) | 0 <$

$t_1 < t_2\}$, де w -вінеровський процес в $\mathbb{R}^d, d = 2,3$, має локальний час. Значить має місце наступне представлення:

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0+} \int_{\Delta_2} f_\varepsilon(w(t_2) - w(t_1)) dt = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0+} \int_{\mathbb{R}^d} f_\varepsilon(x) l(x, \Delta_2) dx, \quad (2.19)$$

де $f_\varepsilon(x) = \frac{1}{(2\pi\varepsilon)^{d/2}} e^{-\frac{\|x\|^2}{2\varepsilon}}$.

Згідно леми 2.1 $f_\varepsilon \rightarrow \delta$, при $\varepsilon \rightarrow 0$, тоді якщо б $l(x, \Delta_2)$ була неперервною в нулі функцією, границя 2.19 дорівнювала б $l(0, \Delta_2)$. Але функція $l(x, \Delta_2)$ не є неперервною в нулі, більш того границя 2.19 є нескінченною.

Для того що б це довести представимо функцію f_ε через перетворення Фур'є, як в доведенні теореми 2.1, тобто

$$f_\varepsilon(x) = \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{\mathbb{R}^d} e^{iux} e^{-u^2\varepsilon/2} du.$$

Тоді, застосовуючи теорему о монотонній збіжності отримаємо рівність для границі:

$$\begin{aligned} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0+} \int_{\mathbb{R}^d} f_\varepsilon(x) l(x, \Delta_2) dx &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0+} \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} l(x, \Delta_2) e^{iux} dx e^{-u^2\varepsilon/2} du = \\ &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0+} \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\Delta_2} e^{iu(w(t_2) - w(t_1))} dt e^{-u^2\varepsilon/2} du = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0+} \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{\mathbb{R}^d} \hat{\mu}_{\Delta_2}(u) e^{-u^2\varepsilon/2} du = \\ &= \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{\mathbb{R}^d} \hat{\mu}_{\Delta_2}(u) du = \int_{\mathbb{R}^d} |\hat{\nu}_{\Delta_2}(u)|^2 du, \end{aligned}$$

де $\hat{\nu}_{\Delta_2}(u)$ - міра відвідування вінеровського процесу на Δ_2 . Але так як w - не має локального часу, значить $\hat{\nu}_{\Delta_2}$ не має L^2 щільності, а значить 2.19 є нескінченною[8].

Очевидно, що є деякий взаємозв'язок між локальним часом та локальним

часом самоперетину випадкового процесу. Але згідно з наведеною вище властивістю, цей зв'язок виводиться для перенормованих величин. А саме, С. Варадан довів наступний факт.

Теорема 2.4 [9] *Для кожного $t > 0$ існує границя*

$$L_2 - \lim_{x \rightarrow 0} \left[\pi l(x, \Delta_2(t)) - t \ln \frac{1}{\|x\|} \right],$$

яка співпадає з перенормованим по Розену локальним часом самоперетину кратності 2 для вінеровського процесу $L_2^w(t)$.

Висновок до розділу 2

В другій частині були розглянуті деякі характеристики, такі як локальний час та локальний час самоперетину, що виникають при дослідженні геометричних властивостей траєкторій випадкових процесів, які описують поведінку полімерів.

Було розглянуте апроксимуюче сімейство $T_{\varepsilon,k}^w$ локального часу самоперетину, та доведено необхідність переходу до перенормованих величин. Зокрема було розглянуте доведення існування L_2 границі для перенормованих по Розену апроксимуючих величин $T_{\varepsilon,k}^w$.

Також було доведено існування локального часу для випадкового поля виду:

$$Y(t) = (w(t_2) - w(t_1), w(t_3) - w(t_2), \dots, w(t_{n+1}) - w(t_n)),$$

де $\{w(t), t \in \mathbb{R}_+\}$ - вінеровський процес в $\mathbb{R}^d, d = 2, 3$.

3 УСЕРЕДНЕННЯ ХАРАКТЕРИСТИК ПОЛІМЕРІВ У ПЕРІОДИЧНОМУ СЕРЕДОВИЩІ

Нехай $\{w(t), t \in \mathbb{R}_+\}$ - вінеровський процес в \mathbb{R}^2 . Визначим випадковий процес $X(t) : \mathbb{R}_+^2 \rightarrow \mathbb{R}^2$, наступним чином:

$$X(t) = w(t_2) - w(t_1).$$

Як було показано вище, випадковий процес X використовують для моделювання лінійних полімерів (таких як, наприклад, натуральний каучук, целюлоза, капрон, поліетилен низького тиску).

Нехай полімер знаходиться у періодичному потенційному полі. Такі поля виникають у пористих середовищах, коли основний однорідний матеріал містить малі сторонні частинки (включення). Було виявлено, що в об'ємах які значно перевищують об'єм одного включення, пористе середовище має стійкі фізичні характеристики (теплопровідність, електропровідність та інші), які відрізняються від відповідних характеристик окремих фаз. Такі стійкі характеристики називають усередненими. Отже прикладом періодичного потенційного поля може служити електричне поле пористого середовища.

Отже для визначення усереднених характеристик важливо вміти досліджувати збіжність інтеграла елементарних полів, тобто інтеграл виду: $\int_B p_\varepsilon(X(t)) dt$, де $p : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ - періодична функція, з періодом 1 по кожній координаті, $p_\varepsilon(u) = p(\frac{u}{\varepsilon})$, а $B \in \mathbb{R}^2$ - обмежена борелівська множина. Границя такого інтегралу є середнє електричне поле матеріалу, за допомогою якого можна знайти, наприклад, усереднене значення електропровідності.

Згідно з теоремою 2.3 указаний вище інтеграл має наступне представлення:

$$\int_B p_\varepsilon(X(t))dt = \int_{\mathbb{R}^2} p_\varepsilon(u)l(u,B)du, \quad (3.1)$$

де $l(\cdot, B) \in L_1(\mathbb{R}^2)$ - локальний час процесу X .

Використаємо представлення виду 3.1 та покажемо, що справедлива наступна теорема про збіжність інтеграла.

Теорема 3.1 *Для будь-якої періодичної по кожній координаті функції $p : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$, з періодом 1, виконується збіжність:*

$$\int_B p_\varepsilon(X(t))dt \rightarrow \lambda(B) \cdot \int_{[0,1]^2} p(u)du, \text{ при } \varepsilon \rightarrow 0+,$$

де $p_\varepsilon(u) = p(\frac{u}{\varepsilon})$, $B \in \mathbb{R}^2$ - обмежена борелівська множина, λ - міра Лебега в \mathbb{R}^2 .

Для доведення данної збіжності використовуються допоміжні теореми, в яких наведена границя інтегралів $\int_{[-1,1]^2} p_\varepsilon(u)f(u)du$ та $\int_{\mathbb{R}^2} p_\varepsilon(u)f(u)du$, де $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ - неперервна функція.

Теорема 3.2 *Для будь-якої неперервної функції $f : [-1,1] \rightarrow \mathbb{R}$ та періодичної функції $p : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, з періодом 1, виконується збіжність:*

$$\int_{-1}^1 p_\varepsilon(u)f(u)du \rightarrow \int_0^1 p(u)du \int_{-1}^1 f(y)dy, \text{ при } \varepsilon \rightarrow 0+,$$

де $p_\varepsilon(u) = p(\frac{u}{\varepsilon})$.

Доведення. Покладемо $\varepsilon = \frac{1}{n}, n \in \mathbb{N}$, виконаємо заміну змінних $x = un$ та пред-

ставимо інтеграл, як суму інтегралів по множинам, що неперетинаються:

$$\int_{-1}^1 p_\varepsilon(u)f(u)du = \frac{1}{n} \int_{-n}^n p(x)f\left(\frac{x}{n}\right)dx = \frac{1}{n} \sum_{i=-n}^{n-1} \int_i^{i+1} p(x)f\left(\frac{x}{n}\right)dx. \quad (3.2)$$

Для доведення необхідної збіжності розглянемо різницю між інтегралом 3.2 та можливою границею. Проведемо ряд перетворень: представимо границю, як суму інтегралів по прикладу 3.2 та зробимо групування, маючи на увазі, що p -періодична функція, отже $\forall i \in \mathbb{Z} \int_0^1 p(u)du = \int_i^{i+1} p(u)du$.

$$\begin{aligned} & \left| \frac{1}{n} \sum_{i=-n}^{n-1} \int_i^{i+1} p(x)f\left(\frac{x}{n}\right)dx - \int_0^1 p(u)du \int_{-1}^1 f(y)dy \right| = \\ & = \left| \frac{1}{n} \sum_{i=-n}^{n-1} \int_i^{i+1} p(x)f\left(\frac{x}{n}\right)dx - \frac{1}{n} \int_{-n}^n f\left(\frac{y}{n}\right)dy \int_0^1 p(u)du \right| = \\ & = \left| \frac{1}{n} \sum_{i=-n}^{n-1} \int_i^{i+1} p(x)f\left(\frac{x}{n}\right)dx - \frac{1}{n} \sum_{i=-n}^{n-1} \int_i^{i+1} p(x)dx \int_i^{i+1} f\left(\frac{y}{n}\right)dy \right| \leq \\ & \leq \frac{1}{n} \left| \sum_{i=-n}^{n-1} \int_i^{i+1} \int_i^{i+1} p(x)(f\left(\frac{x}{n}\right) - f\left(\frac{y}{n}\right))dydx \right| \leq \\ & \leq \frac{1}{n} \sum_{i=-n}^{n-1} \left| \max_{|x-y| \leq \frac{1}{n}} (f\left(\frac{x}{n}\right) - f\left(\frac{y}{n}\right)) \right| \left| \int_i^{i+1} p(x)dx \right| = \\ & = 2 \int_0^1 |p(x)|dx \cdot \left| \max_{|x-y| \leq \frac{1}{n}} (f\left(\frac{x}{n}\right) - f\left(\frac{y}{n}\right)) \right|. \end{aligned}$$

Функція f - неперервна на відрізку $[-1, 1]$, тобто вона є рівномірно неперервною на цьому ж відрізку, тоді згідно визначення:

$$\forall \varepsilon > 0 \exists \delta_\varepsilon > 0 \forall x_1, x_2 \in [-1, 1] (|x_1 - x_2| < \delta_\varepsilon) \Rightarrow (|f(x_1) - f(x_2)| < \varepsilon).$$

Значить,

$$\forall \varepsilon > 0 \exists N_0 \in \mathbb{N} \forall n \leq N_0 : \left| \max_{|x-y| \leq \frac{1}{n}} \left(f\left(\frac{x}{n}\right) - f\left(\frac{y}{n}\right) \right) \right| < \varepsilon.$$

Тоді, $\forall \varepsilon > 0 \exists N_0 \in \mathbb{N} \forall n \leq N_0$:

$$\begin{aligned} & \left| \int_{-1}^1 p_\varepsilon(u) f(u) du - \int_0^1 p(u) du \int_{-1}^1 f(y) dy \right| \leq \\ & \leq 2 \int_0^1 |p(x)| dx \cdot \left| \max_{|x-y| \leq \frac{1}{n}} \left(f\left(\frac{x}{n}\right) - f\left(\frac{y}{n}\right) \right) \right| < \varepsilon \int_0^1 |p(u)| du \end{aligned}$$

Тобто виконується необхідна збіжність.

□

Аналогічно можна показати збіжність інтегралів в просторі \mathbb{R}^d , $d \geq 1$. Для прикладу, розглянемо випадок $d = 2$, тоді перетворення 3.2 буде виглядати наступним чином:

$$\begin{aligned} \int_{[-1,1]^2} p_\varepsilon(u) f(u) du &= \frac{1}{n^2} \int_{-n}^n \int_{-n}^n p(x_1, x_2) f\left(\frac{x_1}{n}, \frac{x_2}{n}\right) dx_1 dx_2 = \\ &= \frac{1}{n^2} \sum_{i=-n}^{n-1} \sum_{j=-n}^{n-1} \int_i^{i+1} \int_j^{j+1} p(x_1, x_2) f\left(\frac{x_1}{n}, \frac{x_2}{n}\right) dx_1 dx_2. \end{aligned}$$

Всі інші перетворення проводяться аналогічно одновимірному випадку.

Отже для будь-якої неперервної функції $f : [-1, 1]^d \rightarrow \mathbb{R}$ та функції $p : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ - періодичної по кожній координаті, з періодами 1, виконується збіжність:

$$\int_{[-1,1]^d} p_\varepsilon(u) f(u) du \rightarrow \int_{[0,1]^d} p(u) du \int_{[-1,1]^d} f(y) dy, \text{ при } \varepsilon \rightarrow 0+,$$

де $p_\varepsilon(u) = p(\frac{u_1}{\varepsilon}, \dots, \frac{u_n}{\varepsilon})$.

Розглянемо простір \mathbb{R}^2 , та покажемо, що виконується та ж сама збіжність, як в теоремі 3.6, але з необмеженими межами інтегрування.

Теорема 3.3 Для будь-якої неперервної, абсолютно інтегрованої по всій площині функції $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ та періодичної функції $p : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$, з періодом 1, виконується збіжність:

$$\int_{\mathbb{R}^2} p_\varepsilon(u) f(u) du \rightarrow \int_{[0,1]^2} p(u) du \int_{\mathbb{R}^2} f(y) dy, \text{ при } \varepsilon \rightarrow 0+,$$

де $p_\varepsilon(u) = p(\frac{u_1}{\varepsilon}, \frac{u_2}{\varepsilon})$.

Доведення. Для будь-якого $n \in \mathbb{N}$ інтеграл можна представити як суму трьох інтегралів:

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^2} p_\varepsilon(u) f(u) du &= \int_{-\infty}^n \int_{-\infty}^{+\infty} p_\varepsilon(u_1, u_2) f(u_1, u_2) du_1 du_2 + \\ &+ \int_{-n}^n \int_{-\infty}^{+\infty} p_\varepsilon(u_1, u_2) f(u_1, u_2) du_1 du_2 + \int_n^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} p_\varepsilon(u_1, u_2) f(u_1, u_2) du_1 du_2. \end{aligned}$$

Так само розкладемо інтеграл $\int_{\mathbb{R}^2} f(u) du$.

Введемо позначення: $C = \int_{[0,1]^2} p(u) du$. Мають місце наступні нерівності:

$$\begin{aligned} & \left| \int_{\mathbb{R}^2} p_\varepsilon(u) f(u) du - C \int_{\mathbb{R}^2} f(y) dy \right| \leq \\ & \leq (|\max_{u \in [0,1]^2} p(u)| + |C|) \int_{-\infty}^n \int_{-\infty}^{+\infty} |f(u_1, u_2)| du_1 du_2 + \\ & + (|\max_{u \in [0,1]^2} p(u)| + |C|) \int_n^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} |f(u_1, u_2)| du_1 du_2 + \\ & + \left| \int_{-n}^n \int_{-\infty}^{+\infty} p_\varepsilon(u_1, u_2) f(u_1, u_2) du_1 du_2 - C \int_{-n}^n \int_{-\infty}^{+\infty} f(u_1, u_2) du_1 du_2 \right| \end{aligned}$$

Обидва перших інтеграла в правій частині нерівності збігаються до 0 при $n \rightarrow +\infty$.

Розглянемо останній доданок окремо, в якому поміняємо місцями порядок інтегрування та проведемо схлжі перетворення:

$$\begin{aligned}
& \left| \int_{-n}^n \int_{-\infty}^{+\infty} p_\varepsilon(u_1, u_2) f(u_1, u_2) du_1 du_2 - C \int_{-n}^n \int_{-\infty}^{+\infty} f(u_1, u_2) du_1 du_2 \right| = \\
& = \left| \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-n}^n p_\varepsilon(u_1, u_2) f(u_1, u_2) du_1 du_2 - C \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-n}^n f(u_1, u_2) du_1 du_2 \right| \leq \\
& \leq (|\max_{u \in [0,1]^2} p(u)| + |C|) \left(\int_{-\infty}^k \int_{-n}^n |f(u_1, u_2)| du_1 du_2 + \int_k^{+\infty} \int_{-n}^n |f(u_1, u_2)| du_1 du_2 \right) + \\
& + \left| \int_{-k}^k \int_{-n}^n p_\varepsilon(u_1, u_2) f(u_1, u_2) du_1 du_2 - C \int_{-k}^k \int_{-n}^n f(u_1, u_2) du_1 du_2 \right|
\end{aligned}$$

Так же як і у попередньому випадку, у правій частині нерівності обидва перших інтеграла збігаються до 0 при $n \rightarrow +\infty$. При цьому згідно з теоремою 3.2, при фіксованих значеннях $n \in \mathbb{N}$ так $\varepsilon \in \mathbb{N}$ виконується збіжність:

$$\int_{-k}^k \int_{-n}^n p_\varepsilon(u_1, u_2) f(u_1, u_2) du_1 du_2 \rightarrow \int_{[0,1]^2} p(u) du \int_{-k}^k \int_{-n}^n f(u_1, u_2) du_1 du_2, \text{ при } \varepsilon \rightarrow 0+.$$

Отже виконується необхідна збіжність. □

Повернемося до доведення теореми 3.1.

Доведення. У зв'язку з представленням 3.1, а саме:

$$\int_B p_\varepsilon(X(t)) dt = \int_{\mathbb{R}^2} p_\varepsilon(u) l(u, B) du,$$

покажемо, що виконується збіжність

$$\int_{\mathbb{R}^2} p_\varepsilon(u) l(u, B) du \rightarrow \lambda(B) \cdot \int_{[0,1]^2} p(u) du, \text{ при } \varepsilon \rightarrow 0+.$$

Отже перейдемо до дослідження інтеграла $\int_{\mathbb{R}^2} p_\varepsilon(u) l(u, B) du$.

Так як локальний час $l(\cdot, B)$ процесу X є неперервною в будь-якій точці окрім 0, більш того $\lim_{x \rightarrow 0} l(x, B) = +\infty$, розіб'ємо інтеграл на два доданки та введемо допоміжний інтеграл:

$$\int_{\mathbb{R}^2} l(x, B) p\left(\frac{x}{\varepsilon}\right) dx = \int_{B(0, \delta)} l(x, B) p\left(\frac{x}{\varepsilon}\right) dx + \int_{\|x\| \geq \delta} l(x, B) p\left(\frac{x}{\varepsilon}\right) dx + \quad (3.3)$$

$$+ \int_{B(0, \delta)} \frac{1}{\delta} \|x\| l\left(\frac{x}{\|x\|} \delta, B\right) p\left(\frac{x}{\varepsilon}\right) dx - \int_{B(0, \delta)} \frac{1}{\delta} \|x\| l\left(\frac{x}{\|x\|} \delta, B\right) p\left(\frac{x}{\varepsilon}\right) dx = \quad (3.4)$$

$$= \int_{B(0, \delta)} l(x, B) p\left(\frac{x}{\varepsilon}\right) dx + \int_{\mathbb{R}^2} \tilde{l}(x, B) p\left(\frac{x}{\varepsilon}\right) dx - \int_{B(0, \delta)} \frac{1}{\delta} \|x\| l\left(\frac{x}{\|x\|} \delta, B\right) p\left(\frac{x}{\varepsilon}\right) dx, \quad (3.5)$$

де згрупував другий та третій інтеграли отримали наступну функцію:

$$\tilde{l}(x, B) = \begin{cases} l(x, B) & \|x\| > \delta \\ \frac{1}{\delta} \|x\| l\left(\frac{x}{\|x\|} \delta, B\right) & \|x\| \leq \delta \end{cases}.$$

Ця функція є неперервною, так як виконуються наступні збіжності:

- 1) $\tilde{l}(x, B) \rightarrow l(\vec{\delta}, B)$ при $\vec{x} \uparrow \vec{\delta}$, $\vec{\delta} \in \partial B(0, \delta)$;
- 2) $\tilde{l}(x, B) \rightarrow 0$ при $\vec{x} \rightarrow 0$.

Отже згідно теореми 3.3, для неперервної функції $\tilde{l}(x, B)$ виконується на-

ступна збіжність:

$$\int_{\mathbb{R}^2} \tilde{l}(x, B) p\left(\frac{x}{\varepsilon}\right) dx \rightarrow \int_{[0,1]^2} p(u) du \int_{\mathbb{R}^2} \tilde{l}(x, B) dx, \text{ при } \varepsilon \rightarrow 0+. \quad (3.6)$$

Розглянемо інші доданки в розкладі інтеграла $\int_{\mathbb{R}^2} l(x, B) p\left(\frac{x}{\varepsilon}\right) dx$.

- 1) Згідно наступних перетворень інтеграл $\int_{B(0, \delta)} l(x, B) p\left(\frac{x}{\varepsilon}\right) dx$ збігається до нуля:

$$\int_{B(0, \delta)} l(x, B) p\left(\frac{x}{\varepsilon}\right) dx \leq \left(\max_{x \in [0,1]^2} p(x) \right) \int_{B(0, \delta)} l(x, B) dx \rightarrow 0 \text{ при } \delta \rightarrow 0.$$

Збіжність виконується, так як $\int_{\mathbb{R}^2} l(x, B) dx = \mu_B(\mathbb{R}^2) = \int_B \mathbf{1}_{\mathbb{R}^2}(X(t)) dt = \lambda(B) < +\infty$, де μ_B - міра відвідування процесу X .

- 2) Так як $\mu_B(\mathbb{R}^2) = \lambda(B) < +\infty$, та ж сама збіжність виконується для інтеграла

$$\int_{B(0, \delta)} \frac{1}{\delta} \|x\| l\left(\frac{x}{\|x\|} \delta, B\right) p\left(\frac{x}{\varepsilon}\right) dx:$$

$$\begin{aligned} \int_{B(0, \delta)} \frac{1}{\delta} \|x\| l\left(\frac{x}{\|x\|} \delta, B\right) p\left(\frac{x}{\varepsilon}\right) dx &\leq \left(\max_{x \in [0,1]^2} p(x) \right) \frac{1}{\delta} \delta \int_{B(0, \delta)} l\left(\frac{x}{\|x\|} \delta, B\right) dx = \\ &= \left(\max_{x \in [0,1]^2} p(x) \right) \int_{\partial B(0, \delta)} l(x, B) dx \rightarrow 0 \text{ при } \delta \rightarrow 0. \end{aligned}$$

Розглянемо різницю двох інтегралів, кожний з яких представимо як суму трьох інтегралів, згідно перетворень 3.3:

$$\begin{aligned} &\left| \int_{\mathbb{R}^2} l(x, B) p\left(\frac{x}{\varepsilon}\right) dx - \int_{[0,1]^2} p(u) du \int_{\mathbb{R}^2} l(x, B) dx \right| \leq \\ &\leq \left| \int_{B(0, \delta)} l(x, B) p\left(\frac{x}{\varepsilon}\right) dx \right| + \left| \int_{B(0, \delta)} \frac{1}{\delta} \|x\| l\left(\frac{x}{\|x\|} \delta, B\right) p\left(\frac{x}{\varepsilon}\right) dx \right| + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \left| \int_{[0,1]^2} p(u) du \int_{B(0,\delta)} l(x,B) dx \right| + \left| \int_{[0,1]^2} p(u) du \int_{B(0,\delta)} \frac{1}{\delta} \|x\| l\left(\frac{x}{\|x\|}, B\right) dx \right| + \\
& + \left| \int_{\mathbb{R}^2} \tilde{l}(x,B) p\left(\frac{x}{\varepsilon}\right) dx - \int_{[0,1]^2} p(u) du \int_{\mathbb{R}^2} \tilde{l}(x,B) dx \right|,
\end{aligned}$$

де $\tilde{l}(\cdot; B)$ - неперервна функція, яка визначенна вище.

З того, що перші чотири доданка збігаються до 0, при $\delta \rightarrow 0$, та виконується збіжність 3.6, випливає необхідна збіжність інтегралів:

$$\int_{\mathbb{R}^2} l(x,B) p_\varepsilon(x) dx \rightarrow \lambda(B) \int_{[0,1]^2} p(u) du, \text{ при } \varepsilon \rightarrow 0+.$$

□

Висновок до розділу 3

В третій частині було наведене усереднення характеристик полімерів у періодичному середовищі, тобто було знайдено границю інтегралу $\iint_B p_\varepsilon(w(t_2) - w(t_1)) dt_1 dt_2$, де $\{w(t), t \in \mathbb{R}_+\}$ - вінеровський процес в \mathbb{R}^2 . Для цього було доведено декілька допоміжних теорем, в яких наведена границя інтегралів $\int_{[-1,1]^2} p_\varepsilon(u) f(u) du$ та $\int_{\mathbb{R}^2} p_\varepsilon(u) f(u) du$, де $f: \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ - неперервна функція.

ВИСНОВОК

Дана робота була присвячена дослідженню математичних моделей полімерів, зокрема полімерів у періодичному середовищі. Для цього була розглянута класифікація полімерних молекул за геометрією скелета та основні моделі, які використовуються при вивченні полімерів, а саме: модель кулька-стержень, модель кулька-пружина та модель гауссового ланцюга. Для подальшого дослідження було вибрано модель гауссового ланцюга, так як вона дозволяє зрозуміти основні закономірності поведінки багатьох лінійних полімерів. Особливістю полімерів такого виду, є наявність ефекту виключеного об'єму, це важливо враховувати при побудові математичних моделей. Тому були розглянуті геометричні характеристики траєкторій вінеровського процесу: локальний час та локальний час самоперетину.

Окремо було доведено існування локального часу для випадкового поля виду:

$$Y(t) = (w(t_2) - w(t_1), w(t_3) - w(t_2), \dots, w(t_{n+1}) - w(t_n)),$$

де $\{w(t), t \in \mathbb{R}_+\}$ - вінеровський процес в $\mathbb{R}^d, d = 2, 3$. Так як локальний час та локальний час самоперетину взаємопов'язані величини, отримане твердження можливо використовувати в подальших дослідженнях, зокрема в побудові математичної моделі реального лінійного ланцюга, тобто такого що не має самоперетинів.

Також було знайдено усереднення характеристик полімера у періодичному середовищі. Для цього було досліджено збіжність інтеграла виду: $\int_B p_\varepsilon(X(t)) dt$, де $p : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ - періодична функція, з періодом 1 по кожній координаті, $p_\varepsilon(u) = p(\frac{u}{\varepsilon})$, а $B \in \mathbb{R}^2$ - обмежена борелівська множина. Такий інтеграл має місце, коли

полімер знаходиться у періодичному потенційному полі. Такі поля виникають у пористих середовищах, що мають стійкі фізичні характеристики. Отже границя такого інтегралу є середнє потенційне поле матеріалу, за допомогою якого можна знайти, наприклад, усереднене значення електропровідності.

Для доведення данної збіжності використовувались допоміжні теореми, в яких наведена границя інтегралів $\int_{[-1,1]^2} p_\varepsilon(u)f(u)du$ та $\int_{\mathbb{R}^2} p_\varepsilon(u)f(u)du$, де $f: \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ - неперервна функція.

ПЕРЕЛІК ДЖЕРЕЛ ПОСИЛАНЬ

1. Основы физики макромолекул: учеб. пособие [Текст] / О.В. Борисов, Е.Б. Жулина, А.А. Полоцкий и др. — Университет ИТМО, 2015. — С. 75.
2. Булинский, А.В. Теория случайных процессов [Текст] / А.В. Булинский, А.Н. Ширяев. — М.: Физматлит, 2005. — С. 277.
3. Teraoka, Iwao. Polymer Solutions: An Introduction to Physical Properties [Text] / Iwao Teraoka. — Wiley-Interscience, 2002. — P. 349.
4. Хадвигер, Г. Лекции об объеме, площади поверхности и изопериметрии [Текст] / Г. Хадвигер. — М.: Наука, 1966. — С. 416.
5. Дороговцев, А. А. Локальные времена самопересечения [Текст] / А. А. Дороговцев, О. Л. Изюмцева // *Укр. мат. журн.* — 2016. — Т. 68, № 3. — С. 290–340.
6. Rosen, Jay S. A renormalized local time for multiple intersections of planar brownian motion [Text] / Jay S. Rosen // *Séminaire de probabilités de Strasbourg*. — 1986. — Vol. 20. — Pp. 515–531.
7. Dynkin, E. B. Regularized Self-Intersection Local Times of Planar Brownian Motion / E. B. Dynkin // *Ann. Probab.* — 1988. — 01. — Vol. 16, no. 1. — Pp. 58–74.
8. Rosen, Jay S. A local time approach to the self-intersections of Brownian paths in space [Text] / Jay S. Rosen // *Comm. Math. Phys.* — 1983. — Vol. 88, no. 3. — Pp. 327–338.
9. Varadhan, S.R.S. Appendix to : Euclidean quantum field theory, by K.Symanzik. / S.R.S. Varadhan // *Local Quantum Theory* [Text]. — R. Jost ed. Academic Press, 1969.